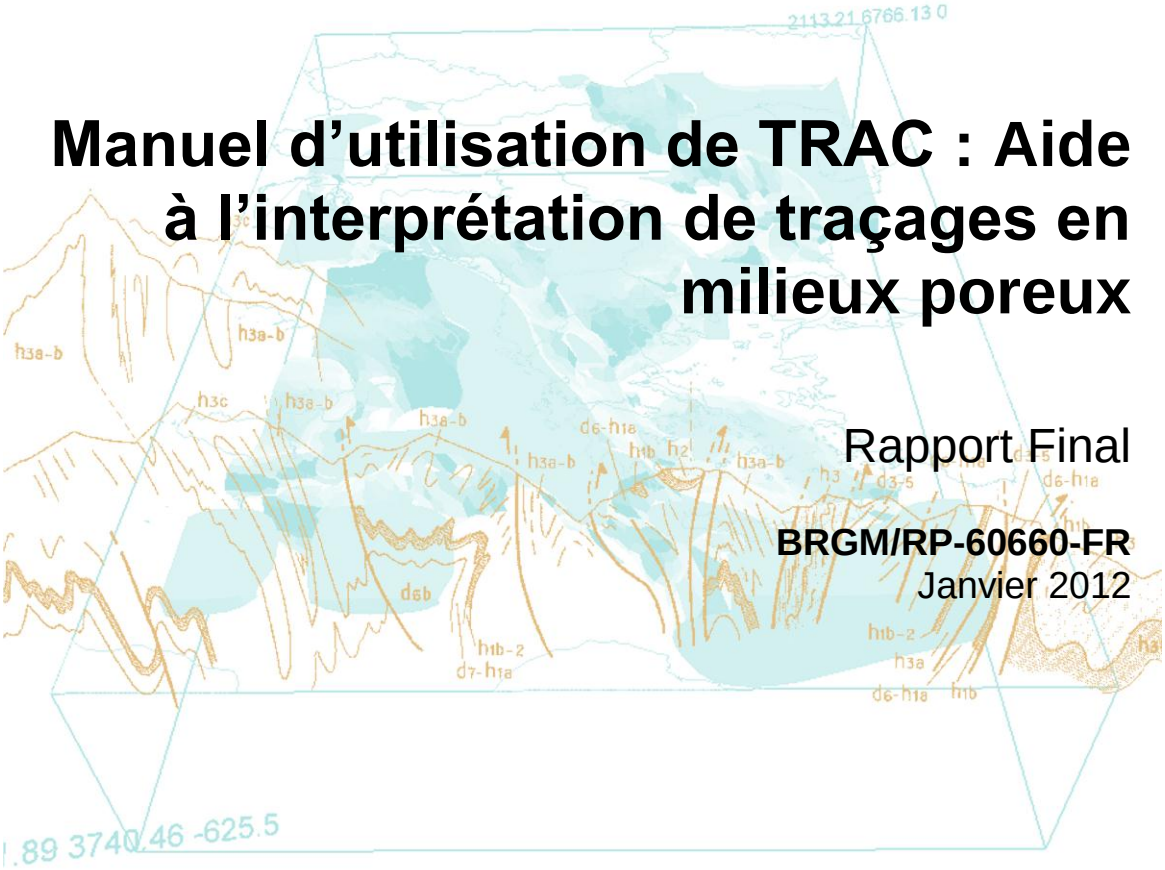
Document public

Manuel d'utilisation de TRAC : Aide à l'interprétation de traçages en milieux poreux



Rapport Final

BRGM/RP-60660-FR
Janvier 2012

Géosciences pour une Terre durable
brgm

Document public

Manuel d'utilisation de TRAC : Aide à l'interprétation de traçages en milieux poreux

Rapport final

BRGM/RP-60660-FR

Janvier 2012

A.Gutierrez, T.Klinka, D.Thiéry

Avec la collaboration de

J. Elsass

Vérificateur :	**Approbateur :**
Nom : Maréchal JC	Nom : Dörfliger Nathalie
Date : 11/03/2012	Date : 15/03/2012
Signature :	Signature :

En l'absence de signature, notamment pour les rapports diffusés en version numérique, l'original signé est disponible aux Archives du BRGM.

Le système de management de la qualité du BRGM est certifié AFAQ ISO 9001:2008.

Géosciences pour une Terre durable

brgm

Mots clés : traçage, milieux poreux, solution analytique, interprétation, paramètres hydrodispersifs, simulation, modélisation, essai de traçage, traceur, courbe de restitution

En bibliographie, ce rapport sera cité de la façon suivante :

A.Gutierrez, T.Klinka, D.Thiéry. Manuel d'utilisation de TRAC : Aide à l'interprétation de traçages en milieux poreux. BRGM rapport RP-60660-FR (2012)

© BRGM, 2012, ce document ne peut être reproduit en totalité ou en partie sans l'autorisation expresse du BRGM.

Remerciements

Le logiciel TRAC a pu voir le jour grâce au cofinancement de la Région Centre. Nous tenons à remercier son président, M. François Bonneau, les élus du Conseil Régional et Mme Caroline Morin De Finfe, chargée de mission, pour avoir retenu notre projet dans le cadre de l'appel à projet de recherche lancé en mars 2008 et nous avoir accordé leur confiance pour 3 ans.

Nous remercions également nos partenaires dans le projet : l'université d'Orléans (S.Binet, M.Motelika), la cellule de recherche et développement CETRAHE à Orléans (Névila Jozja, Christian Defarge, Audrey Dufour), l'Unicem (Christian Soubourou), EDREE (Bruno Leclerc) et les étudiantes, Caroline Fecamp (Polytech Orléans) et Yohana Ahumada (EGID Bordeaux).

En cours de projet nous avons reçu le soutien de nombreux béta-testeurs et de praticiens qui nous ont envoyé des remarques et/ou des jeux d'essais. Nous remercions particulièrement :
S.Brouyères de l'université de Liège (Belgique)
P.Goderniaux de l'université de Rennes
P.Muet de Ginger Environnement à Limoges
P.Meus de European Water Tracing Service à Nandrin (Belgique)
A.Dupuy de l'EGID (Bordeaux)
C.Subias de Calligée (Montpellier)
P.H.Mondain de Calligée (Nantes)
W.Fialkiewicsz de l'université de Wroclaw (Pologne)
P.Gombert de l'Inéris
J.Cuny de l'Agence de l'Eau Seine-Normandie

Enfin, nous tenons à saluer les compétences et la patience de J.Elsass, informaticien indépendant, qui a développé ce code en VB.net et a subi et respecté nos nombreuses demandes parfois contradictoires.

Synthèse

Les traçages sont amplement utilisés en géosciences dans un grand nombre d'applications. L'utilisation de traceurs pour suivre le cheminement de l'écoulement de l'eau, en surface et dans le milieu souterrain se passe le plus souvent d'outil d'interprétation. La présence ou l'absence de traceur, et la vitesse avec laquelle il s'est déplacé dans le milieu sont souvent suffisantes pour démontrer une vulnérabilité ou des circulations soupçonnées. Toutefois, en hydrogéologie des milieux poreux, l'analyse des courbes de restitution du traceur en un ou plusieurs points permet d'aller plus loin. Dans certaines conditions et sous des hypothèses de comportement du traceur, l'interprétation de la courbe de restitution permet d'obtenir des informations indirectes sur le milieu traversé. Malheureusement, cette pratique se heurte à la carence ou la disponibilité d'outils compatibles avec les ordinateurs récents.

Ainsi est né le projet TRAC dont la finalité est de mettre à disposition un logiciel destiné à aider au dimensionnement et à l'interprétation des traçages en milieux poreux. Ce logiciel a été développé grâce à un financement de la Région Centre et du BRGM.

L'objectif de ce manuel est d'accompagner l'utilisateur dans les différents scénarios d'utilisation du logiciel :

- Soit en mode simulation et dimensionnement d'un test de traçage ;
- Soit dans l'interprétation d'un test de traçage.

L'utilisateur pourra directement mettre en pratique TRAC via les tutoriels proposés ou bien utiliser TRAC avec ses données et en utilisant le manuel en appui afin de compléter les informations sur lesquels des détails sont nécessaires.

TRAC propose un ensemble de solutions analytiques compilées d'après la littérature spécialisée, mais l'outil ne se limite aux formulations analytiques proposées (14) et permet, comme le décrit le manuel de le faire évoluer, soit individuellement en modifiant sa propre version de TRAC, soit collectivement en faisant partager ses implémentations à la communauté des utilisateurs. Il est ainsi possible de faire évoluer TRAC et tenir compte des particularités liés sa propre utilisation en :

- Ajoutant de nouvelles solutions analytiques non implémentées jusqu'à présent ;
- Modifiant une langue ou en ajoutant une nouvelle traduction ;
- Ajoutant de nouvelles unités propres à certains systèmes.

Sommaire

1. Introduction 9

2. TRAC : prise en main 11

2.1. INSTALLATION 11

2.2. INVITE DE DEMARRAGE DE TRAC / PREMIERE UTILISATION DE TRAC .. 12
2.2.1. Prise en main de TRAC en quelques minutes 14
2.2.2. Interface de TRAC 19

2.3. SIMULER ET DIMENSIONNER UN TRAÇAGE 39
2.3.1. Dossier 39
2.3.2. Formule 40
2.3.3. Paramètres 41
2.3.4. Dimensionnement 46

2.4. INTERPRETER UN TRAÇAGE 49

3. Tutoriels : exemples d'application 57

3.1. INTERPRETATION D'UN TRAÇAGE 57
3.1.1. Essais de traçages en colonne au laboratoire 57
3.1.2. Suivi d'une pollution anthropique en écoulement naturel 70
3.1.3. Essais de traçages sur le terrain en écoulement radial convergent 78

3.2. SIMULATION ET DIMENSIONNEMENT D'UN TRAÇAGE 80
3.2.1. Traçage en écoulement forcé : radial convergent 80

4. Conclusion 85

5. Bibliographie 87

Liste des illustrations

Illustration 1 : Invite de TRAC 13
Illustration 2 : Liste des fichiers récents 14
Illustration 3 : Simulation d'un traçage en colonne 16
Illustration 4 : Interprétation d'un essai de traçage en écoulement radial convergent 18
Illustration 5 : Fenêtres principales TRAC (gauche) et fenêtre Graphique (droite) 20
Illustration 6 : Onglets du mode « Simulation » 20
Illustration 7 : Onglets du mode « Interprétation » 20
Illustration 8 : Onglet Impression 22
Illustration 9 : Fenêtre aperçu avant impression 23
Illustration 10 : Onglet Options 25
Illustration 11 : Module de traduction de TRAC 25
Illustration 12 : Fenêtre graphique 26
Illustration 13 : Opération sur les courbes, somme des concentrations 29
Illustration 14 : Styles des courbes 30
Illustration 15 : Tableau de valeurs temps, concentration 31
Illustration 16 : Informations sur la courbe 32
Illustration 17 : Fenêtre graphique 32
Illustration 18 : Analyse de sensibilité (2 dimensions) 33
Illustration 19 : Analyse de sensibilité (3 dimensions) 34
Illustration 20 : Exemple d'export vers Surfer® pour visualisation 34
Illustration 21 : Bornes par défaut d'un paramètre 37
Illustration 22 : Mode « Simulation » 41
Illustration 23 : Calcul du volume du puits 42
Illustration 24 : Exemple d'injection par paliers de concentration 43
Illustration 25 : Champ paramètre 44
Illustration 26 : Converstion d'unité 44
Illustration 27 : Définition des bornes des paramètres 45
Illustration 28 : Onglet « Paramètres » 46
Illustration 29 : Onglet « Dimensionnement » 48
Illustration 30 : Exemple de fréquence d'échantillonnage en concentration (Δc=100 µg/L) 48
Illustration 31 : Onglet Données 51
Illustration 32 : Import / Saisie des données 52
Illustration 33 : Sélection des données selon un intervalle de temps 53

Illustration 34 : Filtrage des données 53
Illustration 35 : Symbole des données 54
Illustration 36 : Mode interprétation, exemple d'ajustement automatique 55
Illustration 37 : Caractéristiques de la colonne 58
Illustration 38 : Resitution du traceur 59
Illustration 39 : Onglet Dossier 60
Illustration 40 : Onglet Données 61
Illustration 41 : Onglet Formule 62
Illustration 42 : Ajustement de la courbe simulée 63
Illustration 43 : Résultat après calibration automatique 65
Illustration 44 : Résultats et paramètres de calage, graviers moyens 66
Illustration 45 : Résultats et paramètres de calage, graviers gros 66
Illustration 46 : Résultats et paramètres de calage, mélange de 25% graviers gros et de 75% graviers moyens 66
Illustration 47 : Résultats et paramètres de calage, billes de verre 66
Illustration 48 : Synthèse des paramètres hydrodispersifs 67
Illustration 49 : Comparaison de la porosité totale et de la porosité cinématique 67
Illustration 50 : Tableau de valeurs, relation entre dispersivité et diamètre moyen des grains 68
Illustration 51 : Graphique montrant la relation entre la dispersivité et le diamètre moyen des grains 69
Illustration 52 : Concentration en CNB au droit du captage AEP 70
Illustration 53 : Schéma de la zone étudiée 71
Illustration 54 : Période de pollution 72
Illustration 55 : Comparaison entre observation et différents jeux de calage 75
Illustration 56 : Masse injectée 76
Illustration 57 : Calage d'un essai de traçage en écoulement radial convergent 80
Illustration 58 : Simulations d'un traçage 82
Illustration 59 : Jeux de courbes simulées 83
Illustration 60 : Analyse de sensibilité 83
Illustration 61 : Exemple de schéma de traçage 94

Liste des annexes

Annexe 1 Caractéristiques des colonnes de traçages 89
Annexe 2 Programmation de nouvelles formules dans TRAC 91
Annexe 3 : TRAC, a collaborative computer tool for tracer-test interpretation 95

1. Introduction

Les traçages sont amplement utilisés en géosciences dans un grand nombre d'applications. L'utilisation de traceurs pour suivre le cheminement de l'écoulement de l'eau, en surface et dans le milieu souterrain se passe le plus souvent d'outil d'interprétation. La présence ou l'absence de traceur, et la vitesse avec laquelle il s'est déplacé dans le milieu sont souvent suffisantes pour démontrer une vulnérabilité ou des circulations soupçonnées. Toutefois, en hydrogéologie des milieux poreux, l'analyse des courbes de restitution du traceur en un ou plusieurs points permet d'aller plus loin. Dans certaines conditions et sous des hypothèses de comportement du traceur, l'interprétation de la courbe de restitution permet d'obtenir des informations indirectes sur le milieu traversé. Malheureusement, cette pratique se heurte à la carence ou la disponibilité d'outils compatibles avec les ordinateurs récents.

Ainsi est né le projet TRAC dont la finalité est de mettre à disposition un logiciel destiné à aider au dimensionnement et à l'interprétation des traçages en milieux poreux. Ce logiciel a été développé grâce à un financement de la Région Centre et du BRGM.

Le projet TRAC vise à mieux tenir compte des spécificités du milieu naturel et de son influence sur les écoulements souterrains. La prise en compte des paramètres hydrodynamiques et hydrodispersifs du milieu, de la nature, de la quantité et du mode d'injection du traceur permet de mieux anticiper son passage au point de restitution. Le signal de restitution du traceur est porteur d'information sur le milieu traversé qu'il est parfois possible de décrypter : il propose, au travers d'un outil informatique simple et convivial (disponible en français et traduit en anglais et en espagnol), une série de formulations analytiques correspondant à des situations expérimentales existantes et connues afin de quantifier, via une approche inverse, les paramètres du milieu par ajustement des courbes théoriques aux données de traçage observées. Il permet en outre, par une approche directe, de mieux dimensionner ces essais par une simulation de leurs effets.

A notre connaissance, les outils analytiques disponibles pour l'interprétation de traçage/transport sont peu nombreux. On dénombre principalement CXTFIT (Toride et al., 1995) disponible via le programme STANMOD (Simunek et al., 1999), dédié aux expériences de laboratoire, QTRACER2 (Field, 2002) spécialisé sur le milieu karstique ; TRACI95 (Käss, 1998) pour le milieu poreux, mais c'est le logiciel CATTI (Sauty et al., 1992) qui constitue la référence et dont TRAC s'est largement inspiré. Une partie de ces programmes ont été développés avec les systèmes d'exploitation MS-DOS ce qui explique que certains d'entre eux ne soient plus compatibles avec les système d'exploitations récents Windows.

Dans ce rapport, le terme modèle analytique désigne un modèle qui ne nécessite pas une discrétisation spatiale du domaine simulé (un maillage), et la résolution d'une matrice d'équations. TRAC fait appel à des techniques numériques, notamment

l'intégration numérique ou la convolution, mais l'outil se limite à la mise en œuvre de modèles analytiques.

Par rapport aux modèles numériques, les modèles analytiques sont généralement utiles à un stade amont d'un projet, notamment pour du dimensionnement, lorsque l'information concernant la complexité du milieu naturel est peu disponible. Un des principaux atouts des modèles numériques est leur capacité à prendre en compte cette complexité, et notamment l'hétérogénéité du sous-sol ou des conditions aux limites complexes. Les solutions analytiques, par contre, supposent que la géométrie du domaine simulé est relativement simple. Malgré leurs limites, les modèles analytiques peuvent être très utiles pour des analyses simplifiées, et sont de ce fait très utilisés dans la pratique.

TRAC propose un ensemble de solutions analytiques compilées d'après la littérature (cf. Bibliographie) dont la plupart est reprise dans Sauty, 1992 et Wexler, 1991. Ces solutions correspondent à des problèmes classiques de transport de masse en milieux poreux saturés. Face à la multiplicité des solutions élaborées depuis plusieurs décennies dans le domaine de l'hydrogéologie quantitative, il a fallu faire un choix et les solutions retenues en dernière instance ne représentent qu'un très faible pourcentage du total publié. En particulier, le milieu fissuré n'a pas été abordé (les solutions analytiques y sont d'ailleurs rares). Ce sont donc des problèmes simples et susceptibles d'être rencontrés fréquemment, qui ont été sélectionnés : ils correspondent à des écoulements monophasiques dans des milieux poreux homogènes.

Les différentes hypothèses d'application des solutions analytiques supposent un aquifère homogène, infini du point de vue de son extension horizontale et dont l'écoulement répond à une géométrie donnée (uniforme 1D, 2D, 3D ou radiale). L'aquifère est systématiquement constitué d'une seule couche. L'injection du traceur peut-être instantanée (de type 'Dirac'), continue ou bien par paliers de concentrations. En plus de l'interprétation par ajustement des paramètres hydrodispersifs par essai et erreur (modélisation directe), TRAC dispose d'un module permettant l'optimisation des paramètres (modélisation inverse par l'algorithme de Rosenbrock (1960) modifié) afin d'ajuster automatiquement la courbe simulée aux données d'observation.

Une des motivations pour développer TRAC a été d'étudier des techniques permettant de modéliser le transport de solutés en milieux poreux saturés.

Bien que TRAC soit dédié à l'interprétation de traçage en hydrogéologie son champ d'application est large (transport de polluants) et il est prévu d'implémenter de nouvelles méthodes (milieu à double porosité, écoulement 3D) dans ses prochaines versions. Par ailleurs, TRAC est un logiciel collaboratif, en ce sens, chaque utilisateur peut ajouter des solutions analytiques dont il à l'usage et qui ne serait pas actuellement intégré au logiciel dans la version distribuée, ce qui ajoute une dimension évolutive à l'outil.

Ce manuel donne les informations de référence pour l'utilisation du programme TRAC. Le lecteur peut se référer au rapport intitulé « Validation du logiciel TRAC : Aide à

l'interprétation de traçages en milieu poreux » (Klinka et Gutierrez, 2012) pour les informations sur la validation du programme et l'implémentation des solutions analytiques.

Ce rapport s'articule autour de deux parties :

- La première partie présente l'interface et les fonctionnalités de TRAC ;
- La seconde partie est un tutoriel proposant différents problèmes de transport au travers d'exemples d'interprétations de traçages et de simulations et dimensionnement de traçage.

2. TRAC : prise en main

2.1. INSTALLATION

Le logiciel TRAC est diffusé sous licence freeware, téléchargeable gratuitement via son site web à l'adresse : http://trac.brgm.fr. Le fichier d'installation à télécharger pèse environ 1,5 Mo. Ce manuel a été rédigé sur la base de TRAC version 1.6.

TRAC fonctionne sous système d'exploitation Microsoft Windows, à partir de Windows 98 et est compatible avec les derniers systèmes d'exploitations Windows XP, Vista et Seven (7). Il nécessite la présence du composant logiciel « Framework.NET 2.0 » ou version supérieure permettant d'exécuter des applications développées avec la plate-forme Microsoft .NET. Ce dernier est généralement déjà installé par défaut sur les systèmes d'exploitation à jour. Si lors de l'installation de TRAC ce dernier n'était pas présent sur votre système, un message vous invitera à télécharger ce composant et à l'installer.

TRAC est actuellement disponible en 3 langues : français, anglais et espagnol. Il est possible de sélectionner la langue par défaut dès l'installation du logiciel, une fois installé les autres langues demeurent disponibles. TRAC incorpore un module de traduction graphique permettant de modifier la traduction des termes selon la langue.

De plus, le module de traduction offre la possibilité à l'utilisateur d'ajouter une nouvelle langue et de traduire lui-même progressivement les termes usités. Ainsi la communauté des utilisateurs peut aisément améliorer la traduction du logiciel même et également disposer d'une version de TRAC dans une ou plusieurs nouvelle langue (allemand, norvégien, …).

Le répertoire d'installation par défaut du programme TRAC est « C:\Program Files\TRAC n°version », un autre emplacement peut être librement sélectionné.

Les données utilisateurs (sauvegardes, courbes) sont stockées dans le répertoire « Mes Documents\TRAC» ceci à des fins d'accessibilité des résultats et de compatibilité avec les systèmes d'exploitation Windows 7 et supérieurs.

L'arborescence des répertoires « programme » (C:\Program Files\TRAC 1.5) et « utilisateur » (Mes Documents\TRAC) de TRAC, est constituée des sous-répertoires suivants :

Répertoire	Sous-répertoire	Description
Program files\TRAC\	Aide	Contient la documentation relative à TRAC (rapport de validation, manuel d'utilisation, aide en ligne du logiciel)
Program files\TRAC\	Docs	Contient une copie de secours des répertoires utilisateurs de TRAC (répertoire : Courbes, Données, Dossiers, Export, Fortran) accessibles dans Mes Documents\TRAC
Program files\TRAC\	Images	Contient les images des schémas de traçage utilisés dans TRAC.
Mes documents\TRAC\	Courbes	Stocke les jeux de courbes simulées (Mode « Simulation »)
Mes documents\TRAC\	Données	Stocke les jeux de données expérimentales de traçage (observations)
Mes documents\TRAC\	Dossiers	Stocke les fichiers « dossier TRAC » (Modes « Simulation » ou « Interprétation »)
Mes documents\TRAC\	Export	Stocke les exports numériques (temps, concentration) via le tableau de valeurs
Mes documents\TRAC\	Fortran	Stocke les bibliothèques Fortran éventuellement utilisées par TRAC
Mes documents\TRAC\	*.INI et *.TXT	Les fichiers *.ini et *.txt (Options.ini, Fortran.ini, Bandeau297x210.txt, Bandeau210x297.txt) stockent certains paramètres de TRAC

Des exemples de simulation et d'interprétation de traçages sont fournis avec TRAC. Ces fichiers sont utilisés dans la partie tutoriel au chapitre « 3 Tutoriels : exemples d'application ».

2.2. INVITE DE DEMARRAGE DE TRAC / PREMIERE UTILISATION DE TRAC

Au démarrage de TRAC, la première fenêtre qui s'affiche à l'écran appelée « invite de TRAC », propose deux modes d'utilisation du logiciel (Illustration 1) :

- Le premier mode « Simulation » permet de simuler le transport d'un soluté et de dimensionner un traçage à l'aide de différentes solutions analytiques, de tracer la courbe de concentration au point de restitution. Différentes configurations de traçage sont possibles selon la géométrie de l'écoulement, le type d'injection ou

conditions aux limites. Sur la base de cette simulation, il est ensuite possible de dimensionner un traçage expérimental en définissant la masse de traceur à injecter ainsi que la fréquence d'échantillonnage.

- Le second mode d'utilisation « Interprétation » permet à l'utilisateur d'interpréter un traçage, d'importer des données expérimentales (temps, concentration, débit) et d'interpréter l'essai à l'aide d'une solution analytique correspondant à la configuration du traçage. Ce mode dispose d'un outil d'optimisation afin d'aider à l'ajustement des paramètres hydrodispersifs.

L'invite de TRAC (Illustration 1) permet également d'accéder directement aux fichiers récemment ouverts à l'aide du bouton « Fichiers récents » (Illustration 2). Le bouton « Langue » permet de modifier la langue de TRAC. Enfin, le bouton « A propos » affiche les informations relatives à TRAC (numéro de version, date de mise à jour, contact, adresse du site web, licence). Le numéro de version est directement lisible dans la barre de titre de l'invite « TRAC : Interprétation et dimensionnement de traçages (v1.6) ».

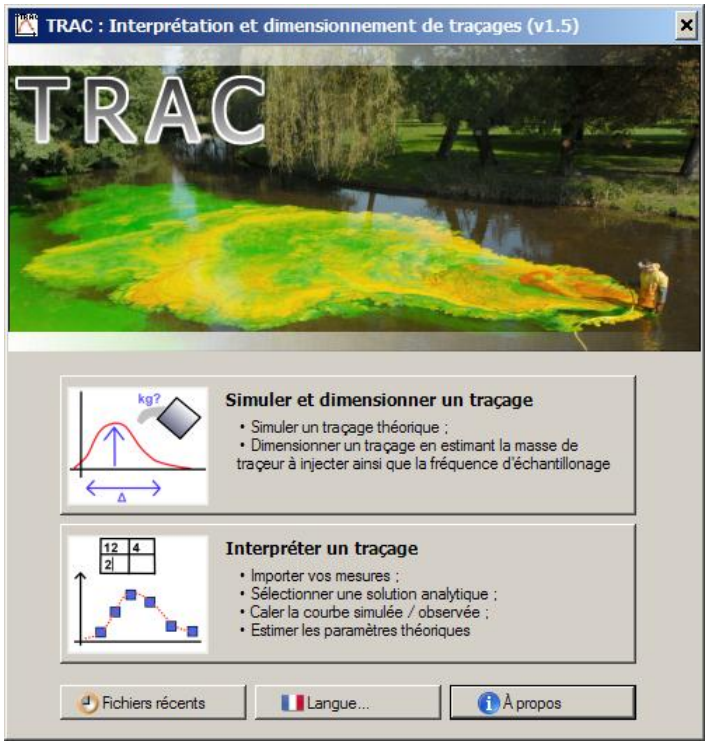


Illustration 1 : Invite de TRAC

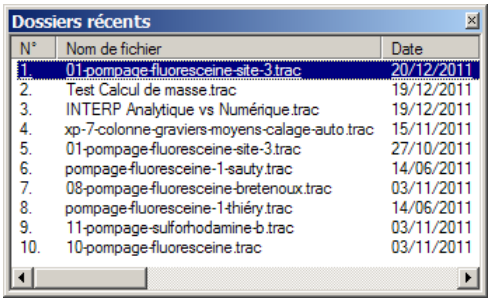


Illustration 2 : Liste des fichiers récents

2.2.1. Prise en main de TRAC en quelques minutes

Les chapitres suivants du manuel de TRAC décrivent précisément les multiples fonctionnalités offertes par le programme. Cependant, il n'est pas nécessaire au premier abord d'en prendre connaissance pour l'utiliser, TRAC étant un programme intuitif et convivial.

Ce cours chapitre propose une prise en main de l'outil rapide. Si l'utilisateur souhaite acquérir une connaissance plus approfondie de certaines fonctionnalités il peut se référer aux chapitres suivants.

Simuler et dimensionner un traçage en colonne

La simulation d'un traçage permet d'une part de prévoir le comportement du traceur selon une configuration définie et d'autre part de dimensionner cet essai pour une application ultérieure. Une expérience souvent réalisée en laboratoire consiste à étudier l'entraînement d'éléments dissous ou particulaires dans un milieu (naturel ou artificiel) via un essai de traçage afin d'en déterminer les caractéristiques hydrodispersives.

Pour simuler un traçage, démarrer TRAC, puis à l'invite sélectionner « Simuler et dimensionner un traçage ». Le mode simulation lancé, deux fenêtres apparaissent, la première constituée de 6 d'onglets permet de saisir les données, la seconde est la fenêtre graphique, permettant de visualiser en temps réel les résultats (courbe(s) de restitution).

Les onglets sont organisés par ordre progressif d'utilisation (de gauche à droite). Dans l'onglet « Dossier » saisir les informations relatives à cette simulation : le nom de l'essai et les commentaires permettent rapidement d'identifier votre dossier TRAC lorsque vous l'ouvrirez à nouveau.

Sauvegarder votre dossier TRAC via l'icône « Enregistrez-sous », vous pourrez ainsi charger rapidement ce dossier via la liste des « Fichiers récents ». Dans l'onglet « Formule », utiliser les filtres afin de n'afficher que les solutions nous intéressant :

- Dimensions d'écoulement : 1D, il s'agit d'une colonne, la dispersion transversale est négligeable ;
- Injection : Brève (Dirac), il s'agit d'une masse (dissoute dans un volume d'eau) qui est injecté en un temps court devant le temps de transport.

Le bouton « Mode avancé » permet visualiser toutes les solutions disponibles. Nous sélectionnons la solution [03] qui correspond à un milieu semi-infini (le traceur ne peut pas remonter en amont du point d'injection de la colonne). Une fois la solution sélectionnée, un schéma de la configuration de traçage apparaît ainsi que les paramètres de la solution analytique. L'onglet « Paramètres » devient actif et il est possible de renseigner les valeurs suivantes :

- Masse : $1x10^{-3}$ kg (1 g) ;
- Porosité, valeur a priori : 0.1 (10%) ;
- Vitesse réelle u : $1x10^{-4}$ m/s ;
- Section d'écoulement (en l'occurrence la surface de la colonne) : $S=\pi.r^2=1.13x10^{-2}$ m^2 ;
- Distance injection – restitution (longueur de la colonne) : 0.7 m ;
- Dispersivité longitudinale, valeur a priori : 0.05 m ;
- Le temps de demi-vie est optionnel et peut-être utilisé si le traceur est sujet à la dégradation.

Les paramètres peuvent être saisis dans une autre unité que celle proposée (USI), pour cela cliquer sur l'unité afin de faire apparaître le convertisseur d'unité. Une fois les

paramètres saisis, la fenêtre graphique affiche la courbe de restitution, présentée à l'Illustration 3 ci-dessous.

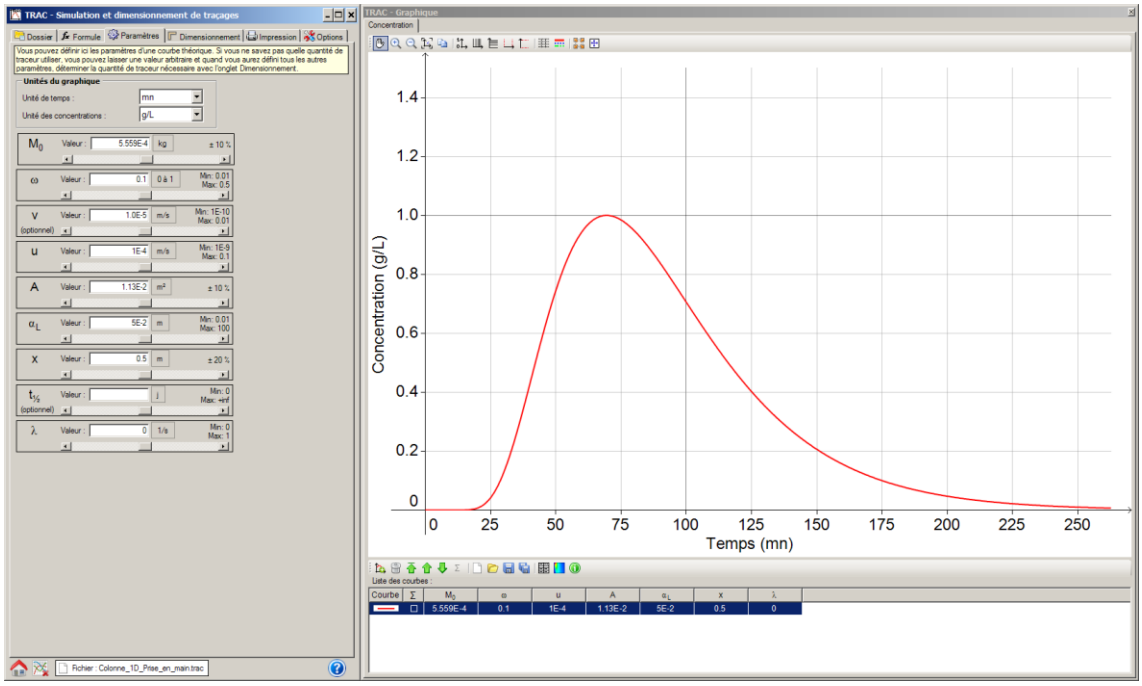


Illustration 3 : Simulation d'un traçage en colonne

Dans la zone « Unités du graphique » située avant les paramètres, modifier les unités de temps (en minutes par exemple) et de concentration afin d'adapter l'échelle selon vos besoins. Le bouton (i) de la fenêtre graphique permet d'obtenir les différentes vitesses (apparente, moyenne, maximale) calculées par TRAC.

Il est possible d'ajouter plusieurs courbes de restitution afin de tester la sensibilité aux différents paramètres du système.

Dans l'onglet « Dimensionnement », saisir la valeur de la concentration minimale attendue dans la case ad'hoc et cliquer sur déterminer afin de calculer la masse à injecter pour obtenir une telle concentration.

Interpréter un traçage en écoulement radial convergent

L'interprétation d'un essai de traçage permet de déterminer les paramètres hydrodispersifs du milieu ainsi que le taux de restitution du traceur. Une configuration courante des essais de traçage correspond à un pompage induisant un écoulement radial convergent. Il est proposé d'interpréter rapidement un jeu de données issue d'un essai de terrain. Pour interpréter un traçage, démarrer TRAC, puis à l'invite sélectionner « Interpréter un traçage ». Le mode interprétation lancé, deux fenêtres apparaissent, la première constituée de six d'onglets permet de saisir les données, la seconde est la fenêtre graphique, permettant de visualiser en temps réel les résultats (courbe(s) de restitution).

Les onglets sont organisés par ordre progressif d'utilisation (de gauche à droite). Dans l'onglet « Dossier » saisir les informations relatives à cette interprétation : le nom de l'essai et les commentaires permettent rapidement d'identifier votre dossier TRAC lorsque vous l'ouvrirez à nouveau.

Sauvegarder votre dossier TRAC via l'icône « Sauvegarder-sous ». Vous pourrez ainsi charger rapidement ce dossier via la liste des « Fichiers récents ». Dans l'onglet « Données », cliquer sur le bouton « Importer » afin d'importer les données de l'essai de traçage (format *.csv) et sélectionner le fichier « 01-pompage-fluoresceine-site-3.csv » dans le répertoire « Trac\Dossiers\Tutoriels\Pompage Radial ». Une fois les données importées, la fenêtre graphique est mise à jour des données de l'essai.

Dans l'onglet « Formules » utiliser les filtres afin de n'afficher que les solutions nous intéressant :

- Dimensions d'écoulement : Radial, on note que dans cette configuration la dispersion transversale est négligeable ;
- Injection : Brève (Dirac), il s'agit d'une masse qui est injecté en un temps court.

Nous sélectionnons la solution semi-analytique [18] qui correspond à un milieu infini (le traceur peut remonter en amont du piézomètre d'injection). Une fois la solution sélectionnée, un schéma de la configuration de traçage apparaît ainsi que les paramètres de la solution analytique. L'onglet « Paramètres » devient actif et il est possible de renseigner les valeurs des paramètres connus :

- Masse : 6.2×10^{-4} kg ;
- Epaisseur : 6.25 m ;
- Distance injection-prélèvement : 13.9 m ;
- Débit de pompage : 39.5 m^3/h ;

Les paramètres non connus sont introduit dans un premier temps à une valeur a priori afin d'initialiser le calcul puis ajustés par essai/erreur :

- Porosité : 0.1, ajustée à 0.19 ;
- Dispersivité : 0.1 ajustée à 0.5 ;
- La vitesse est calculée automatiquement d'après la porosité.

Le calage obtenu est présenté à l'Illustration 4 ci-dessous.

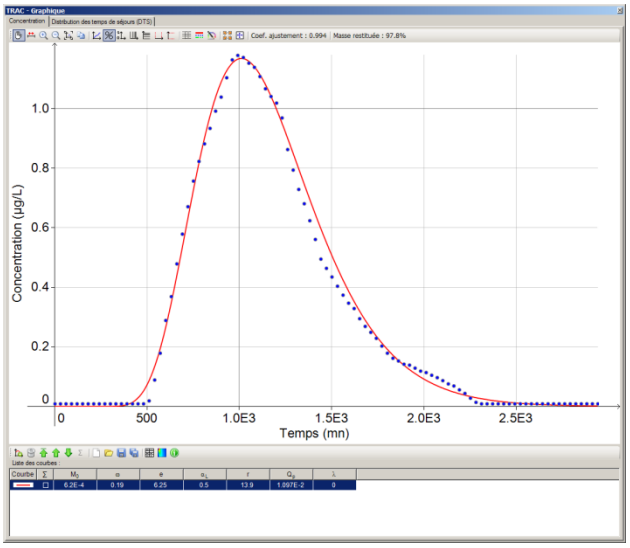


Illustration 4 : Interprétation d'un essai de traçage en écoulement radial convergent

2.2.2. Interface de TRAC

Quel que soit le mode d'utilisation sélectionné (« Simulation » ou « Interprétation »), TRAC est construit autour de deux fenêtres afin de permettre d'une part la saisie des données (entrée) et d'autre part l'affichage des résultats sous forme de courbe(s) de concentration (sortie) :

- La fenêtre principale (Illustration 5, à gauche) intitulée « TRAC - Simuler et dimensionner un traçage » ou « TRAC - Interpréter un traçage », selon le mode sélectionné, permet à l'utilisateur par l'intermédiaire d'onglets successifs de saisir les données d'entrée, de choisir une solution analytique et de modifier les valeurs des paramètres hydrodispersifs ;

- La fenêtre graphique (Illustration 5, à droite) intitulée « TRAC - Graphique » permet d'afficher les résultats des simulations ou interprétations (courbe de concentration simulée, points d'observations, courbe de distribution des temps de séjours), elle peut être affichée ou masquée à tout moment (icône en bas de la fenêtre principale ou raccourci clavier Ctrl+g). Cette fenêtre permet également de présenter les différents jeux de paramètres (différents jeux de courbes) pour une même solution analytique et d'exporter ces résultats (fichier *.csv, *.txt) ou de les copier directement dans un tableur. Dans la version actuelle de TRAC, il n'est pas possible d'afficher simultanément les courbes de concentration de différentes solutions analytiques (en revanche il est possible d'afficher plusieurs jeux de courbes d'une même solution analytique).

Presque toutes les fonctions accessibles dans TRAC à la souris sont réalisables au clavier pour plus d'aisance, via une liste de raccourcis claviers. Les raccourcis sont décrits ci-après ou au fil du texte, en général, glisser le pointeur de la souris sur un bouton d'action a pour effet d'afficher une info bulle avec une description de l'action du bouton et son raccourci associé.

En bas de la fenêtre graphique, une icône en forme de maison permet de quitter le mode actuel (fermeture de la fenêtre principal et de la fenêtre graphique) afin de retourner à l'invite de TRAC, permettant de choisir entre l'un des deux modes disponibles (raccourci clavier : Ctrl+q). L'icône suivante (graphique) permet d'afficher ou masquer la fenêtre graphique, enfin l'encart « Nouveau » indique le nom du fichier actuellement ouvert par TRAC. Un clic gauche sur le nom du fichier permet d'ouvrir le répertoire où se trouve le fichier. Cette section présente les fonctionnalités de la fenêtre principale et de la fenêtre graphique.

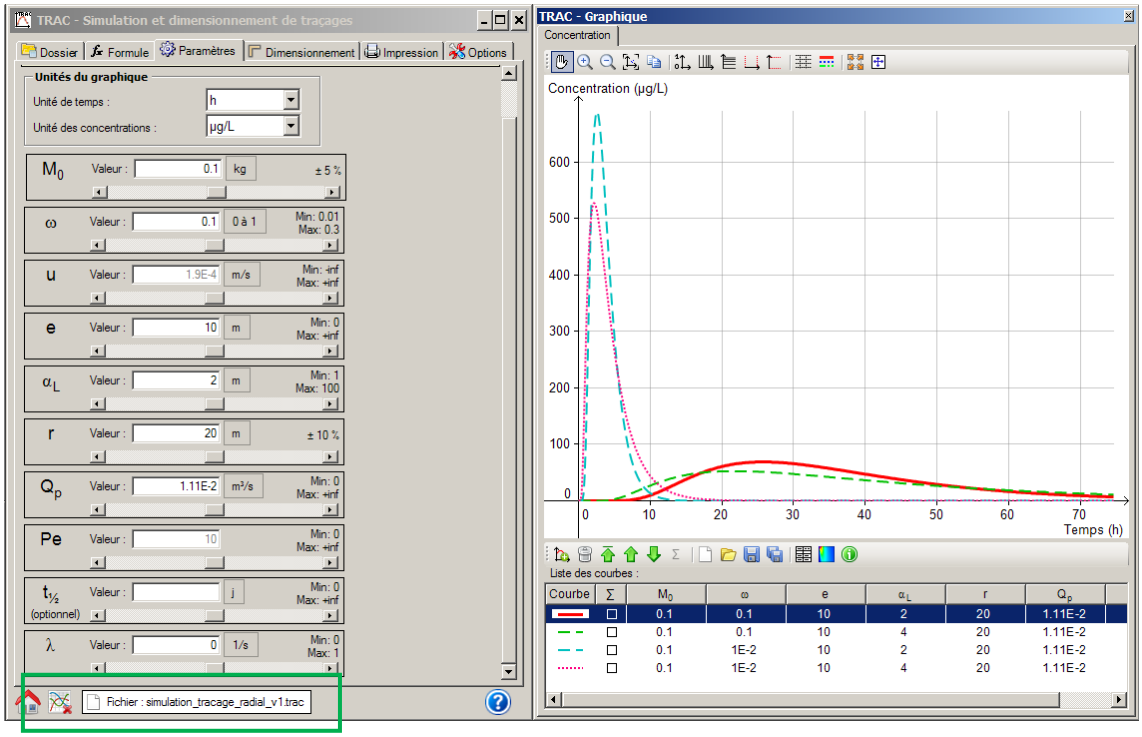


Illustration 5 : Fenêtres principales TRAC (gauche) et fenêtre Graphique (droite)

Fenêtre principale de TRAC

La fenêtre principale est organisée autour d'onglets agencés progressivement selon leur ordre logique d'utilisation. La plupart des onglets est commun aux modes « Simulation » et « Interprétation », il s'agit de Dossier, Formule, Paramètres, Impression et Options, (Illustration 6 et Illustration 7). Deux onglets sont spécifiques à chacun des modes : l'onglet « Dimensionnement » pour le mode Simulation et l'onglet « Données » pour le mode interprétation.

Illustration 6 : Onglets du mode « Simulation »

Illustration 7 : Onglets du mode « Interprétation »

L'onglet « Données » est spécifique au mode « Interprétation » :

- Il permet de saisir ou d'importer les données expérimentales de traçage (temps, concentration, débit), soit à partir de fichiers (*.csv, *.txt) soit directement depuis un tableur par copier-coller.

Les onglets suivants sont communs aux modes « Interprétation » et « Simulation » :

- l'onglet « Dossier » permet de saisir des informations contextuelles et techniques relatives à l'essai de traçage (Nom de l'essai, date de l'essai, traceur utilisé, etc.) ;

- l'onglet « Formule » permet de sélectionner une solution analytique, de visualiser la représentation schématique du système de traçage et les paramètres afférents ;

- l'onglet « Paramètres » permet de définir et de modifier les paramètres de la solution sélectionnée, une fois les paramètres saisis la courbe de concentration est automatiquement calculée ;

- l'onglet « Impression » permet de personnaliser les paramètres d'impression et d'imprimer les résultats sous forme d'une feuille de synthèse (courbe(s) et paramètres) ;

- l'onglet « Options » permet de modifier la langue (ainsi que la traduction) et divers paramètres de TRAC.

L'onglet « Dimensionnement » est spécifique au mode « Simulation » :

- il permet sur la base d'une simulation de transport, de déterminer la masse de traceur à injecter ainsi que la fréquence d'échantillonnage.

Les onglets généraux Impression et Options sont décrits ci-dessous, tandis que les autres onglets sont décrits dans leurs modes d'utilisation respectifs « Simulation » et « Interprétation ».

Onglet « Impression » (Illustration 8)

- Imprimante : permet de sélectionner une imprimante parmi la liste proposée.

- Options d'impression :

    - Imprimer ou non le bandeau (en-tête) lors de l'impression de la feuille de résultats ;

    - Imprimer ou non la courbe DTS (Distribution des Temps de Séjours) si elle est disponible, en plus de la courbe de restitution ;

- Libellés des paramètres complets ou bien écriture symbolique des paramètres (cette forme est plus concise, par exemple « Concentration de l'injection » devient sous forme symbolique « C_0 ») ;

- Le bouton « Mise en page » permet de modifier la dimension du papier, son orientation, les marges, etc. ;

- Le bouton « Edition du bandeau » permet de personnaliser les attributs du bandeau (en-tête) pour l'impression des résultats. Un modèle de présentation est proposé par défaut. La zone de graphique (courbe de restitution) et la liste des paramètres (encart à droite) sont des zones non modifiables ;

- Le bouton « Aperçu » permet d'afficher un aperçu avant impression de la feuille de résultats (Illustration 9). Les différentes informations regroupées sous forme de cadres peuvent être personnalisées via le bouton « Edition du bandeau » ;

- Le bouton « Imprimer » permet d'imprimer (avec confirmation) les résultats en cours.

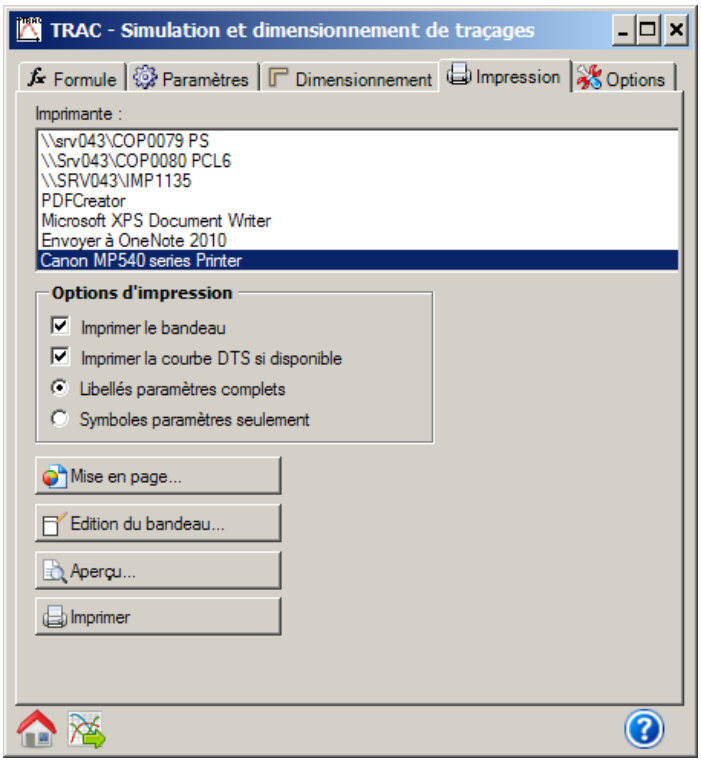


Illustration 8 : Onglet Impression

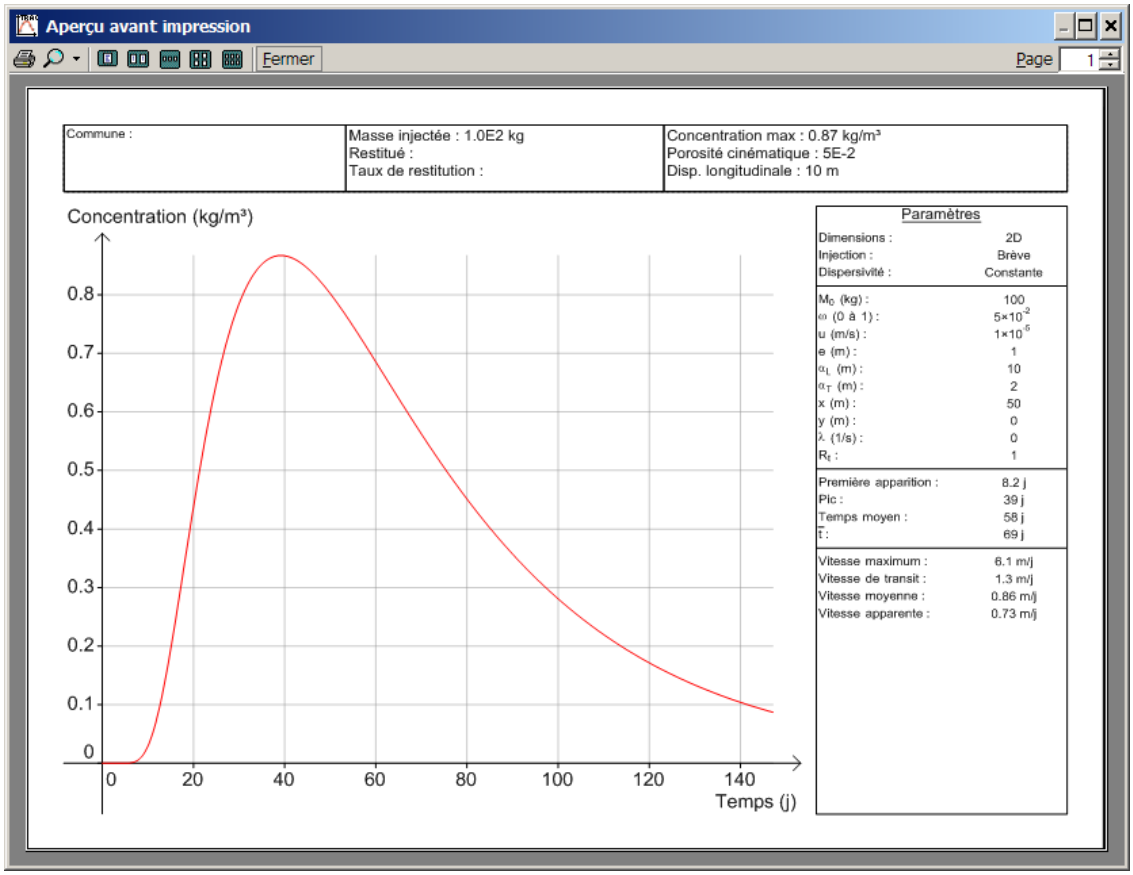


Illustration 9 : Fenêtre aperçu avant impression

Onglet « Options » (Illustration 10)

- Options du graphique (concerne seulement la fenêtre Graphique)
    - Afficher ou non la courbe du cumul de restitution (a seulement un effet en mode « Interprétation » si un débit a été défini) ;
    - Centrer horizontalement / ne pas centrer le titre de l'axe des abscisses ;
    - Centrer verticalement / ne pas centrer le titre de l'axe des ordonnées ;
    - Afficher ou masquer le quadrillage horizontal et vertical ;
    - Utiliser / ne pas utiliser de préférence la notation scientifique : concerne l'affichage au format scientifique des valeurs affichées sur les axes du graphique (sinon, la notation standard est utilisée).

- Options diverses :

    - Facteur de taille pour le copier/coller de l'image du graphique (valeur de 1 à 5) : ce paramètre permet de définir la dimension du graphique exportée dans le presse-papier (icône ou Ctrl+c lorsque le focus est sur la fenêtre graphique). Une valeur de « 2 » exportera dans le presse-papier l'image de la fenêtre graphique à deux fois sa résolution actuelle. Si la fenêtre graphique à une dimension de 600x800 pixels, elle sera exportée en 1 200 x 1 600 pixels, soit un facteur de 2 par rapport à sa résolution native ;

    - Précision des informations sur la courbe (valeur de 2 à 5) : permet de modifier la précision (nombre de chiffres après la virgule) des informations calculées dans la fenêtre « Informations sur la courbe » (dans la fenêtre Graphique : icône ou Alt+i), par exemple : temps de première apparition, concentration maximum, etc. ainsi que les valeurs de paramètres affichées lors de l'impression.

- Le bouton « Langue » permet de modifier la langue de l'interface (le langage de TRAC peut être choisi dès l'installation mais aussi changé par la suite). TRAC est traduit en 2 langues : anglais et espagnol. TRAC doit être redémarré si le changement de langue est effectué via l'onglet « Options » (pour prise en compte d'une éventuelle nouvelle langue ou traduction). A l'inverse, si le changement de langue est effectué à l'invite de TRAC, ce dernier redémarre automatiquement dans la langue sélectionnée. Le bouton langue de l'onglet « Options » permet également de modifier la traduction de tous les termes utilisés. En effet, TRAC incorpore un module de traduction, accessible via le bouton « Saisir une traduction », qui permet de créer une nouvelle langue afin de traduire TRAC dans un autre langage (Illustration 11) ou bien simplement de modifier la traduction actuelle si elle ne s'avère pas adéquate. Les améliorations ou compléments apportés à ce fichier peuvent être transmises au BRGM pour être introduites dans les versions téléchargeables et profiter au plus grand nombre (voir plus loin Trac un projet collaboratif et évolutif)

- Le bouton « Fortran externe » permet d'intégrer des bibliothèques de fonctions codées en Fortran pour une utilisation au sein de TRAC en VB.NET, cette fonctionnalité est réservée aux utilisateurs experts et confère un caractère évolutif à l'outil.

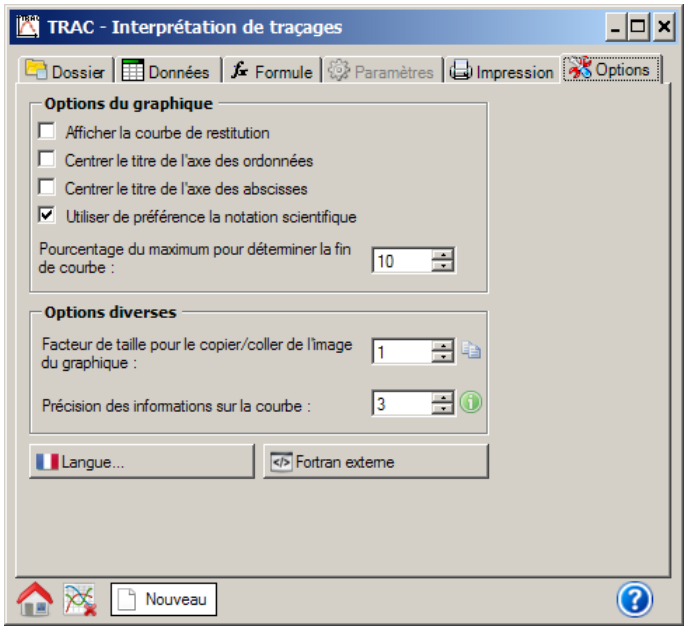


Illustration 10 : Onglet Options

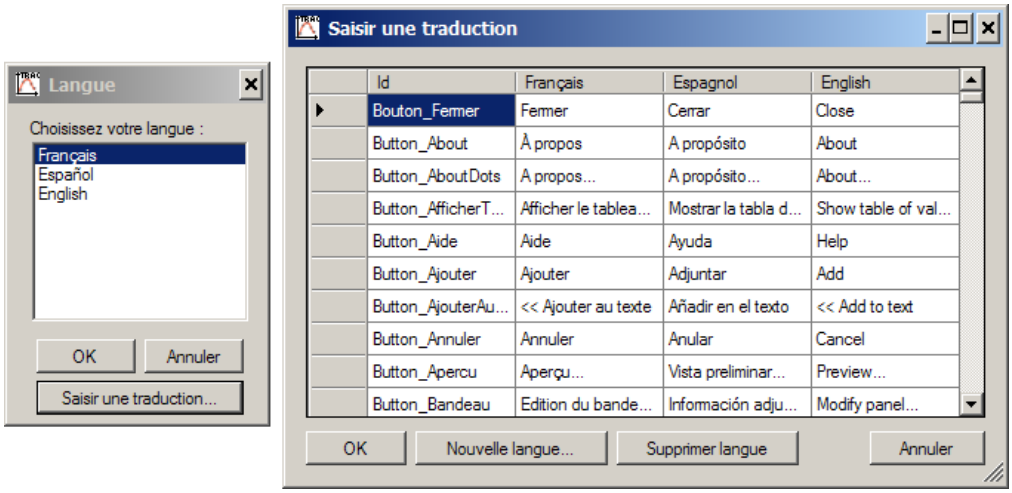


Illustration 11 : Module de traduction de TRAC

Fenêtre graphique

La fenêtre graphique est constituée de l'onglet « Concentration » (Illustration 12) commun aux modes « Simulation » et « Interprétation » et de l'onglet DTS (Distribution des Temps de Séjours) spécifique au mode « Interprétation ». Cette fenêtre peut-être affichée ou masquée à tout moment via l'icône graphique située en bas de la fenêtre principale (Ctrl+g).

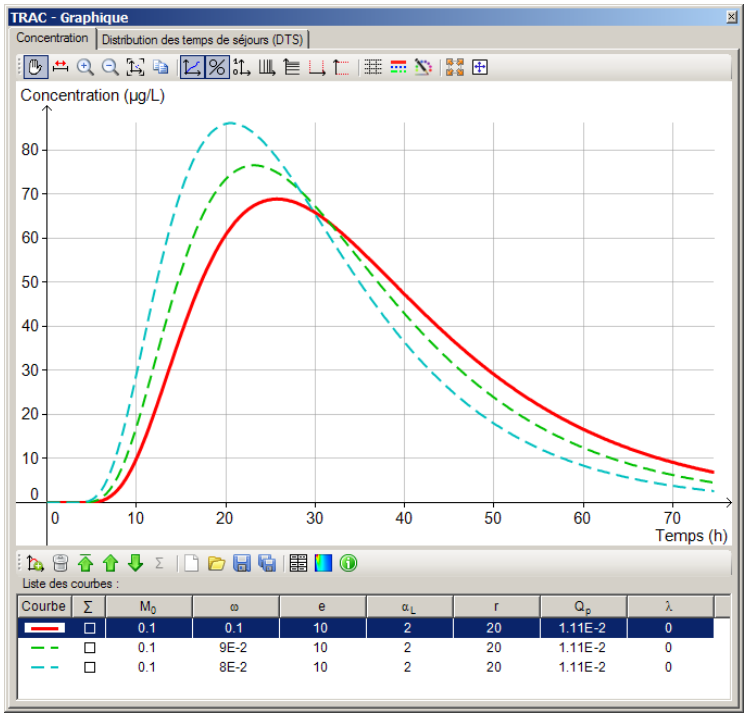


Illustration 12 : Fenêtre graphique

La fenêtre graphique permet de visualiser les résultats de la simulation, mais également d'ajouter une ou plusieurs courbes/simulations dont les paramètres diffèrent (distance point d'injection – point de restitution, dispersivité, temps de demie-vie, …). S'il est possible d'afficher simultanément plusieurs courbes/simulations d'une même solution analytique il n'est en revanche pas possible dans la version actuelle de TRAC d'afficher en même temps les résultats de différentes solutions analytiques. Cependant, différents résultats de plusieurs solutions analytiques peuvent être affichés successivement (mais non simultanément).

La fenêtre graphiques dispose de deux barres d'outils, la première (en haut) à trait au graphique et la seconde (en bas) aux courbes du graphique.

Icone	Barre d'outils du graphique
	Permet de se déplacer sur le graphique (touche M)
	Sélectionner un intervalle (I) (en mode interprétation seulement)
	Zoom avant (agrandir) au niveau du pointeur de la souris (touche « + » ou molette haut)
	Zoom arrière (réduire) au niveau du pointeur de la souris (touche « - » ou molette bas)
	Restaure le zoom par défaut (touche Origine ou Home)
	Permet de copier le graphique dans le presse-papier (Ctrl+c)
	Tracer la courbe de restitution (R) (en mode interprétation seulement)

	Afficher la restitution en pourcentage de la masse de traceur injecté (en mode interprétation seulement)
	Normalise les concentrations (touche N) par rapport à la concentration maximale
	Echelle horizontale arithmétique/logarithmique
	Echelle verticale artithmétique/logarithmique
	Activé, fixe les valeurs minimale et maximale de l'axe des abscisses. Désactivé, les valeurs minimale et maximale de l'axe des abscisses sont recalculées automatiquement
	Activé, fixe les valeurs minimale et maximale de l'axe des ordonnées. Désactivé, les valeurs minimale et maximale de l'axe des ordonnées sont recalculées automatiquement
	Affiche ou masque successivement le quadrillage vertical et/ou horizontal (Alt+g)
	Permet de modifier le style des courbes (couleur, épaisseur, trait, Illustration 14), double cliquer sur une des courbes de la fenêtre graphique permet également d'accéder à ses propriétés
	Bascule l'affichage de la fenêtre graphique en plein écran ou mode fenêtré (par défaut) (Alt+Entrée)
	Permet de conserver les proportions (ratio largeur et hauteur) de la fenêtre graphique lors de son redimensionnement (Ctrl+r)
Icone	**Barre d'outils des courbes**
	Ajoute une nouvelle courbe de paramètres identiques à celle sélectionnée (touche Insert ou Ctrl+a)
	Supprime la courbe sélectionnée (touche Suppr.)
	Positionne la courbe sélectionnée en premier (touche Page Up)
	Déplace la courbe sélectionnée vers le haut
	Déplace la courbe sélectionnée vers le bas
	Active la fonction « Somme de courbes » (bouton actif si au moins une courbe a été sélectionnée/cochée comme étant « à additionner » dans la liste des courbes « Σ »)
	Nouveau jeu de courbe (Alt+n)
	Ouvre un jeu de courbe (Alt+o)
	Sauvegarde le jeu de courbe (Alt+s)
	Sauvegarde-sous le jeu de courbe (Alt+e)
	Affiche le tableau de valeurs de la courbe sélectionnée (Illustration 15) (Alt+t)

	Analyse de sensibilité c=f(x,t,paramètre) (Alt+z)
	Affiche les informations relatives à la courbe sélectionnée (Illustration 16) (Alt+i)

Sommer les courbes de concentration

L'option « Somme » (Illustration 13) permet d'additioner plusieurs courbes de concentration issues d'une même solution analytique.

Il convient cependant de bien avoir conscience de la signification physique de cette opération. En toute rigueur, on ne peut additionner des concentrations entre elles, sauf cas particulier. En effet, lorsqu'un volume d'eau se mélange à un autre, le volume total est la somme des volumes individuels mais la concentration finale n'est pas la somme de leurs concentration respectives. Inversement, la courbe de concentration d'un traçage ne doit pas être décomposée en série de plusieurs courbes, même s'il est vrai que le caractère plurimodal d'une restitution peut être significatif de circulations de l'eau et du traceur dans des milieux différents. Pour faire de telles opérations il faudrait connaitre les débits transitant dans chaque milieu et calculer les flux massiques, qui eux peuvent se cumuler.

Toutefois il existe deux cas particuliers pour lesquels le cumul des concentrations est possible :

- Lorsque les concentrations simulées sont transportées par un même débit. Dans l'hypothèse où le milieu et la vitesse sont homogènes, il est possible d'écrire le flux total, somme des flux 1 et 2 :

$$\Phi_1 = C_1 * Q_1$$
$$\Phi_2 = C_2 * Q_2$$
$$Q_1 = Q_2 = Q$$
$$\Phi_{total} = \Phi_1 + \Phi_2 = \frac{C_1 * Q + C_2 * Q}{Q} = C_1 + C_2$$

C'est par exemple le cas lorsque plusieurs injections d'un même traceur (ou plusieurs pollutions) se succèdent dans le temps, pour un même milieu et un même point d'observation.

- Lorsque deux courbes ou plus se succèdent sans se chevaucher. Chaque courbe est la résultante du transport du traceur dans des milieux qui peuvent être de caractéristiques différentes. Elles apparaissent alors successivement au point d'observation, mais à chaque instant il n'y a qu'un seul flux massique en jeu.

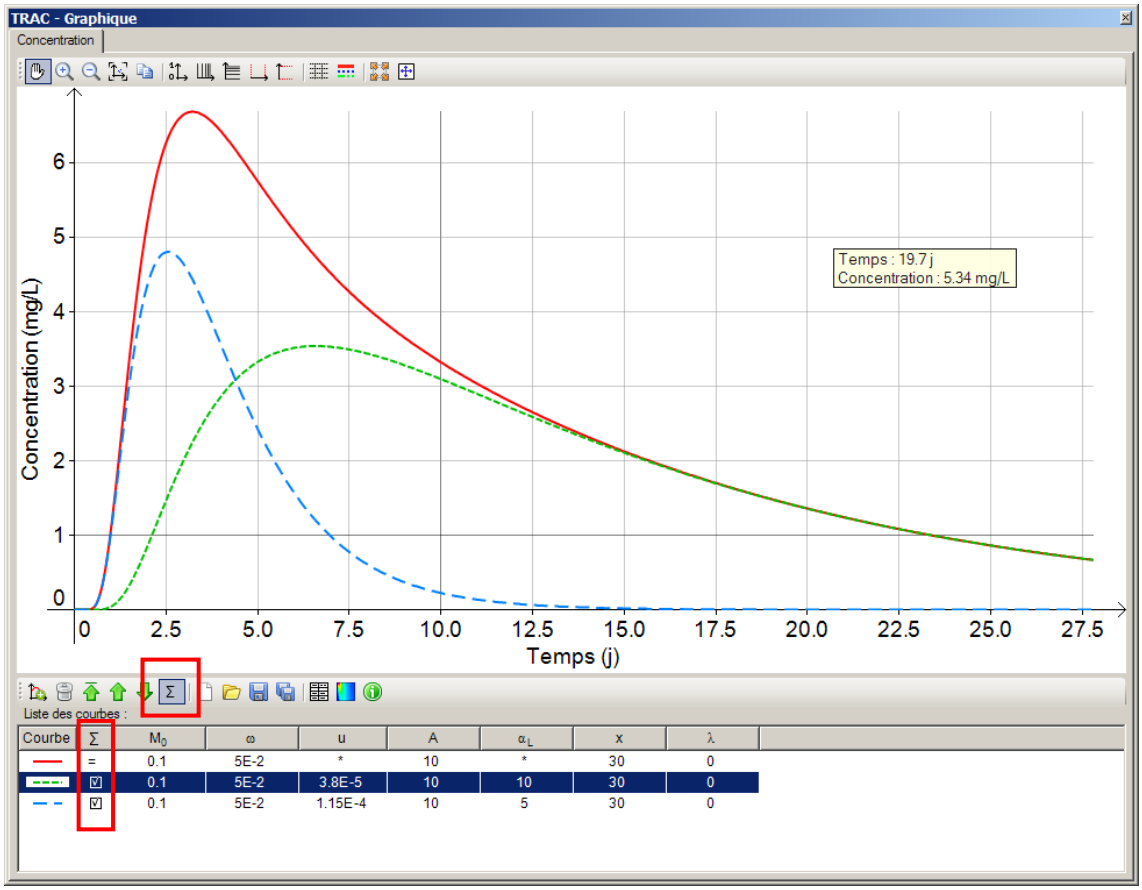


Illustration 13 : Opération sur les courbes, somme des concentrations

Pour réaliser cette opération, il est nécessaire de disposer d'au moins deux courbes, dans la zone « Liste des courbes » située en bas de la fenêtre graphique, cocher la case de la colonne somme « Σ » (à droite de la colonne « Courbe ») de chaque courbe à additionner. Enfin, dans la barre d'outils des courbes, cliquer sur l'icône somme « Σ » pour créer la nouvelle courbe. La courbe « somme » est automatiquement mise à jour des modifications des courbes dont elle est la somme, l'Illustration 13 en est un exemple

Styles des courbes (Illustration 14)

Cette fenêtre, accessible en double cliquant sur l'une des courbes affichées, permet de modifier la couleur, l'épaisseur et le style de trait des courbes. Le style de trait peut être modifié de deux façons :

- par l'utilisation des termes 'Plein', 'Point' et 'Tiret' (Illustration 14), exemple : 'TiretPointTiret'.

- il peut aussi être exprimé grâce à la notation suivante {X, Y}, où X correspond à la longueur (en pixels) de trait plein et Y la longueur (en pixels) de trait sans couleur. Pour une ligne en pointillé, on écrira : {1, 1} ou bien 'TiretPoint'.

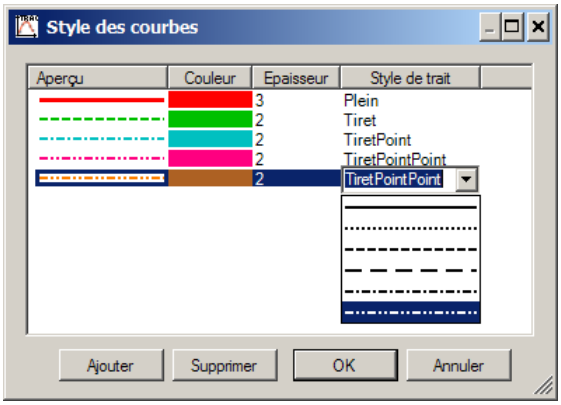


Illustration 14 : Styles des courbes

Tableau de valeurs (export des données - Illustration 15)

Le tableau de valeurs, accessible depuis la fenêtre graphique (icône ou Alt+t) permet de calculer et d'exporter les valeurs numériques C=f(x,y,z,t) calculées avec la solution analytique sélectionnée. Il permet d'exporter les couples de valeurs temps et concentration d'un temps t_{min} à t_{max} selon un intervalle de temps dt.

Dans l'exemple suivant (Illustration 15), les valeurs sont calculées du temps t_{min} = 0 (mn) au temps t_{max}= 55 (mn) tous les dt =1 (mn), soit 56 couples de valeurs (avec c(t=0)=0). Il est possible de définir le nombre de valeurs souhaité au lieu de définir l'incrément en temps, qui est dans ce cas calculé automatiquement. Le nombre de chiffres pour l'expression des concentrations peut-être modifié via l'option « Précision » (valeur de 2 à 6 chiffres).

L'option « Données réelles » (en mode interprétation seulement) permet de générer un tableau de valeurs avec les concentrations simulées aux temps correspondant aux observations. La colonne « Erreur » indique la différence de concentration à chaque temps entre observation et simulation. La case à cocher « Erreur relative » dans l'encart « Options » permet d'afficher l'erreur relative, calculée ainsi : Abs(ValeurExperimentale - ValeurSimulée) / ValeurExperimentale * 100. Le bouton « Vider la table » permet d'effacer le contenu du tableau.

Le bouton « Copier tout » permet de copier tout le tableau de valeurs temps / concentration dans le presse-papier afin de pouvoir le coller immédiatement dans un tableur (Excel, OpenOffice), ce qui permet d'une part de copier les données à la volée et d'autre part de s'affranchir de la création d'un fichier.

Le bouton « Exporter » permet d'exporter le tableau de valeur temps / concentration dans un fichier de type CSV (valeurs séparées par un point-virgule) contenant l'en-tête et les données.

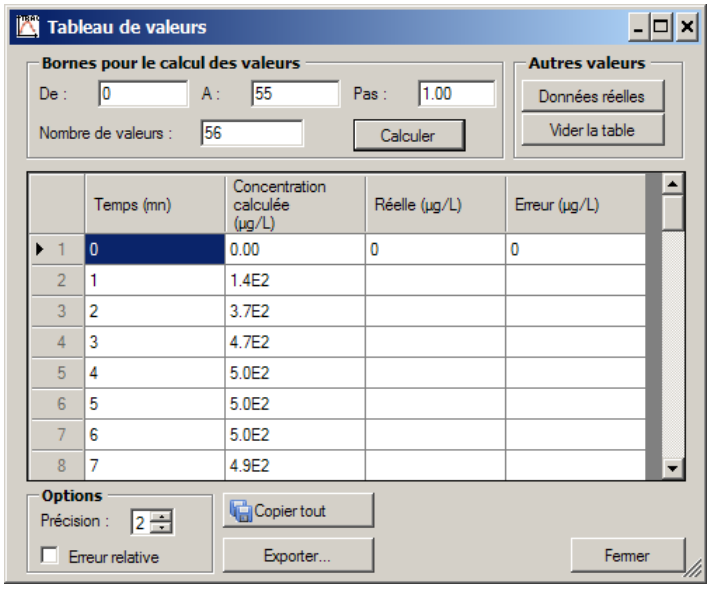


Illustration 15 : Tableau de valeurs temps, concentration

Informations sur la courbe (Illustration 16)

Le bouton « Informations sur la courbe » permet d'afficher un certain nombre de paramètres calculés pour la courbe sélectionnée (Illustration 16) : la durée de restitution, le temps de première apparition, le temps du pic (Cmax). Ces paramètres sont décrits précisément dans le rapport de validation de TRAC (T. Klinka et al., 2012).

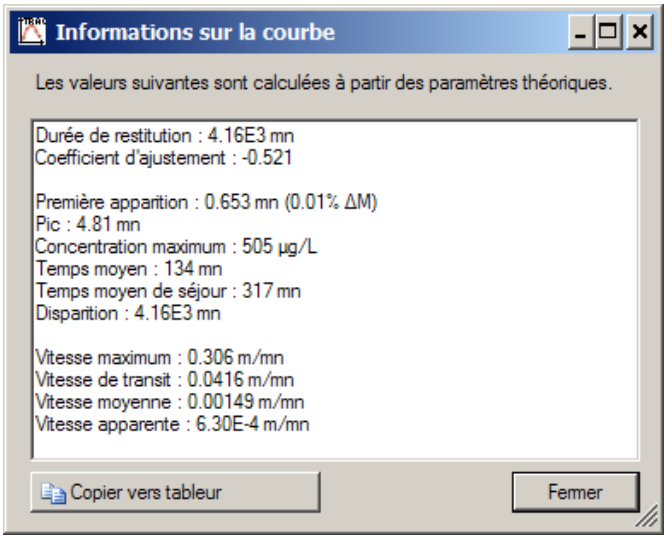


Illustration 16 : Informations sur la courbe

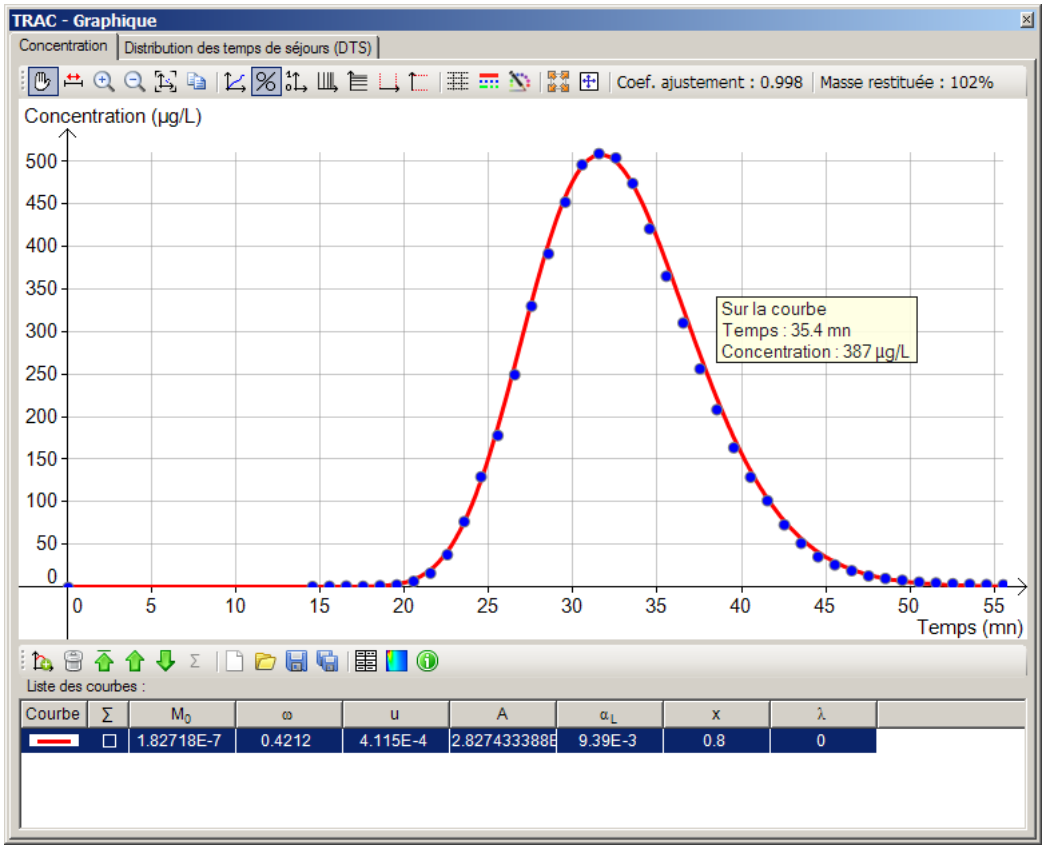


Illustration 17 : Fenêtre graphique

Génération d'un champ (grille) de concentration

La fenêtre graphique permet d'accéder à l'option « Génération d'un champ de concentration ». Cette fonctionnalité permet de représenter la variation de la concentration calculée en fonction d'un ou de plusieurs paramètres afin de juger de l'influence de leur estimation sur le résultat du calcul. L'analyse est réalisée sur la courbe sélectionnée. Jusqu'à trois axes peuvent être définis : le temps plus deux autres paramètres. Selon le nombre de dimensions observées :

- en 2D (Illustration 18) :
  - l'axe des abscisses correspond au temps ;
  - l'axe des ordonnées correspond au paramètre choisi parmi ceux disponibles de la solution analytique.
- en 3D (Illustration 19), pour cela cocher l'option « Troisième axe » :
  - l'axe des abscisses correspondant au temps est remplacé par un deuxième paramètre. Il est alors possible de faire défiler le temps via l'ascenseur horizontal qui est apparu en bas de la fenêtre
  - l'axe des ordonnées reste inchangé par rapport en 2D ;

- l'axe des temps est représenté par un ascenseur horizontal.

Dans tous les cas, c'est le résultat de la solution analytique qui est ainsi cartographiée (en général, la concentration).

L'analyse de sensibilité peut être configurée à l'aide des variables suivantes :

- Paramètre : correspond au paramètre à analyser suivi de son unité SI ;
- De : correspond à la valeur minimale du paramètre ;
- A : correspond à la valeur maximale du paramètre ;
- Pas : correspond à l'incrément du paramètre pour lequel sera calculé la concentration ;
- Nb de cellules : correspond à la discrétisation du paramètre et le nombre de cellules calculées.

Définir le pas calcule automatiquement le nombre de cellules affichées et inversement, définir le nombre de cellules à afficher détermine automatiquement le pas de calcul. L'option précision (valeur de 2 à 6) correspond au nombre de décimales prises en compte, ce qui permet d'ajuster la précision des concentrations calculées pour gagner en temps de calcul.

La grille de concentration qui s'affiche montre des plages de couleurs plus ou moins étalées qui permettent de juger de la sensibilité du paramètre considérée sur le résultat. Ainsi par exemple l'Illustration 18 ci-dessous montre que plus la valeur de la dispersivité longitudinale α_L est grande plus la concentration est étalée dans le temps. De même, avec l'ajout d'un axe supplémentaire tel que la distance (Illustration 19), pour un temps donné la variation de la dispersivité longitudinale est affichée en fonction de la distance parcourue par le traceur.

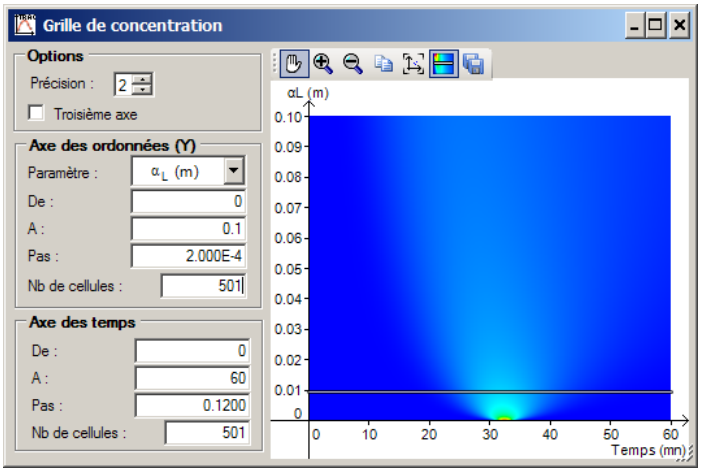


Illustration 18 : Analyse de sensibilité (2 dimensions)

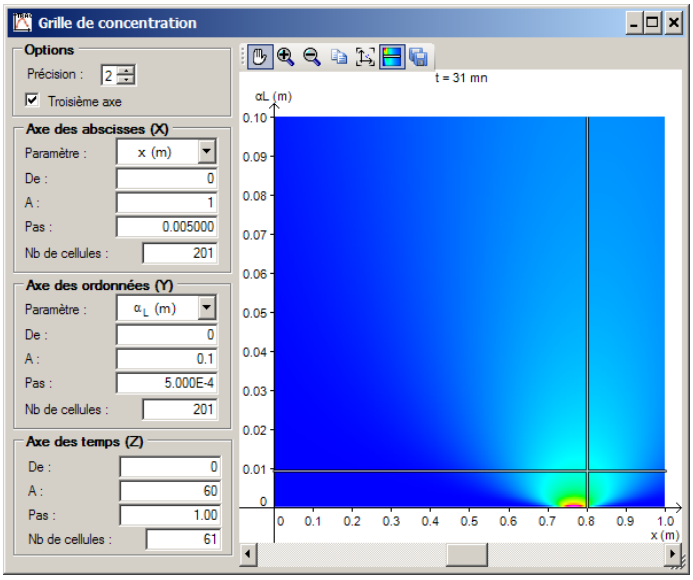


Illustration 19 : Analyse de sensibilité (3 dimensions)

Une barre d'outils située en haut de la fenêtre permet :

- de se déplacer à l'aide la souris dans la fenêtre ;
- de zoomer en avant/en arrière ;
- de faire une copie d'écran du graphique ;
- d'exporter la grille vers trois formats de fichiers :
  - grille Surfer® (*.grd) (Illustration 20) ;
  - en ligne (une ligne par valeur X Y Concentration) (*.csv)
  - sous forme d'une matrice C_{x1y1} ; C_{x2y1} ; ... C_{xnyn} (*.txt).
- de positionner la valeur actuelle du paramètre par une droite (2 droites en 3D)

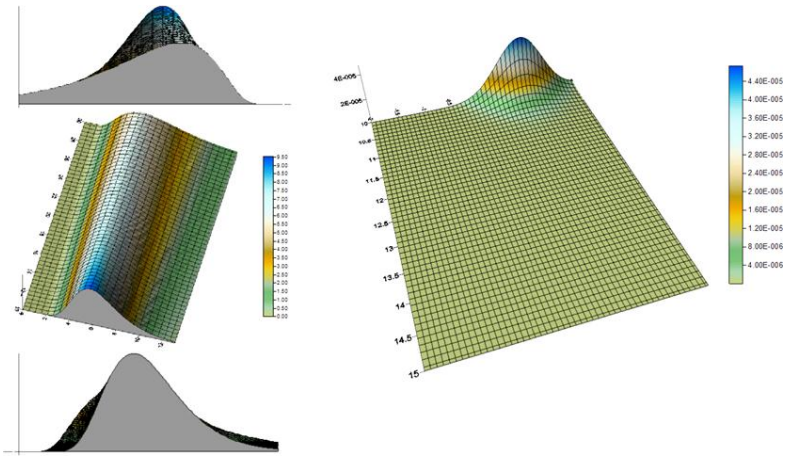


Illustration 20 : Exemple d'export vers Surfer® pour visualisation

Options accessibles hors du programme

Certaines options de TRAC peuvent être directement paramétrées à l'aide de fichiers « *.ini » (autrement appelés fichiers d'initialisation). Ces fichiers sont situés dans le répertoire d'installation (répertoire programme) de TRAC. Leur utilisation est réservée aux utilisateurs expérimentés. Cette partie décrit comment modifier les fichiers INI.

Ces fichiers sont structurés par section. Une section commence par une ligne entre crochets, par exemple dans le fichier « Bornes.ini » on trouve la section [Défaut]. A l'intérieur d'une section, se trouve des couples « clé/valeur(s) », par exemple : omega=0.01;0.3.

- **Ajouter de nouvelles solutions analytiques à TRAC**

Les formules analytiques qui expriment la concentration du traceur en fonction du temps et de l'espace sont nombreuses. L'utilisateur peut être intéressé par des formules qui ne sont pas par défaut dans TRAC. Il est possible de les transcrire en respectant un formalisme décrit en Annexe 2

Les formules par défaut sont contenues dans Formules.ini dont la visualisation donne des exemples du formalisme. Cependant, la modification de ce fichier présente des risques : écrasement des nouvelles formules à chaque nouvelle installation, risque de modifier une formule existante et d'introduire des erreurs involontaires. Aussi, toute nouvelle solution analytique introduite par l'utilisateur doit se faire dans un autre fichier du nom de MesFormules.ini. Ce fichier existe déjà. Il est conseillé de donner à toute nouvelle formule l'attribut « Complexe » (Attributs=Complexe) afin de ne faire apparaitre celles-ci qu'en mode avancé.

Enfin, si certaines formules peuvent apparaitre trop complexes à transcrire ou trop longue à s'exécuter, il est possible de programmer ces fonctions dans le langage de programmation Fortran et de créer un fichier DLL (Dynamic Link Library). Un tel fichier peut être appelé par TRAC, l'exécution de la solution en est accélérée.

Pour cela, il est nécessaire de disposer du code source Fortran (sans programme principal), d'ajouter une instruction DLL_EXPORT pour spécifier les procédures à exporter. Cette instruction doit être rajoutée au début de chaque procédure suivie du nom d'export, qui sera à rappeler lors de l'importation dans TRAC.

Puis, il faut compiler le fichier source avec la ligne de commande suivante :

```
LF95 source.f90 -win -dll -ml msvb
```

où source.f90 est le nom du fichier de code Fortran.

Ensuite, démarrer TRAC, dans l'onglet Options cliquer sur le bouton "Fortran externe". L'interface permet de sélectionner un fichier DLL et une fonction qu'il contient (par son nom d'export). Il est nécessaire de préciser le type des paramètres de la fonction. L'interface de Trac vous assiste dans cette étape et vous montre à quoi doit

ressembler le code Fortran de la fonction afin que vous puissiez vérifier la correspondance.

Enfin, dans le fichier de définition des formules, vous pouvez définir une nouvelle formule qui utilise la fonction en question. Pour cela, écrire d'abord le nom d'export de la fonction suivi d'une parenthèse ouvrante, puis la liste des paramètres séparées par des virgules et enfin terminer par une parenthèse fermante. La nouvelle formule sera prise en compte au prochain démarrage de Trac.

Si TRAC permet l'ajout de formules, c'est avant tout parce qu'il est conçu pour être collaboratif. Ainsi, les ajouts des utilisateurs peuvent-ils être mis en commun par le simple partage du fichier Mesformules.ini. Ces ajouts peuvent être envoyés au BRGM via le site web (http://trac.brgm.fr) sur lequel ces éléments seront mis en ligne et éventuellement ouverts à discussion.

- **Bornes par défaut des paramètres**

Afin de contraindre l'optimisation des paramètres et arriver ainsi à des jeux de paramètres plausibles il est nécessaire de donner des « fourchettes » de valeurs possibles en indiquant pour chaque paramètre, soit une valeur minimale et maximale, soit un pourcentage de variation. Ces intervalles sont fixés dans un fichier externe, Bornes.ini, modifiable par l'utilisateur à l'aide d'un éditeur de texte.

Lorsque TRAC est lancé, il est possible de changer ces bornes via l'interface graphique de TRAC en cliquant dessus, ce changement est enregistré si les données sont sauvegardées. Autrement, afin que les bornes par défaut soient changées de manière permanente (à chaque lancement de TRAC) il est nécessaire de les modifier via le fichier « Bornes.ini ».

Le fichier « Bornes.ini » permet de définir les bornes par défaut des paramètres des solutions analytiques. Une borne correspond à la variation maximale (positive ou négative) d'un paramètre par rapport à sa valeur initiale. L'unique section [Défaut] de ce fichier contient les bornes par défaut, qui peuvent être remplacées par des bornes optionnelles, définies dans les autres sections.

Dans les sections, les clés sont les paramètres (exemple : alpha_T), et les valeurs définissent les bornes de variation (exemple : alpha=1;100 pour 1 à 100) :

- S'il s'agit d'une borne relative, alors la valeur est un nombre suivi du symbole pourcent (%), exemple alpha_T=10%, la valeur de alpha_T pourra varier de plus ou moins 10 % de sa valeur initiale.
- Pour définir les bornes de manière absolue, la valeur contient la borne inferieure suivie d'un point-virgule suivi de la borne supérieure, exemple : alpha_L=1;100.
- Si aucune valeur n'est écrite, la borne est interprétée comme l'infini (absence de limite).

L'exemple ci-dessous est un extrait du fichier « Bornes.ini », l'Illustration 21 montre que les bornes par défaut du paramètre alpha_L dans l'interface de TRAC sont directement liées à ce fichier :

```
[Défaut]
; Masse injectée
M_0=5%+
; Débit
q=10%+
; Débit massique
q_m=10%+
; Concentration d'injection
C_0=10%+
; Porosité cinématique
omega=0.01;0.3
; Dispersivité longitudinale
alpha_L=1;100
```

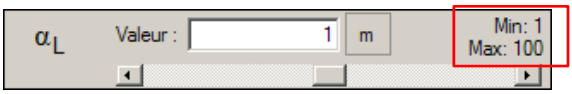


Illustration 21 : Bornes par défaut d'un paramètre

- **Définition des unités et des conversions**

TRAC dispose par défaut d'un grand nombre d'unités. Cependant les unités proposées ne sont pas limitatives et l'utilisateur a la possibilité d'ajouter des unités dont il a l'usage. Le fichier « Unites.ini » situé dans le répertoire programme de TRAC permet de définir les unités utilisées. Elles sont regroupées en section : [Temps], [Concentration], [Débit], etc.

Pour ajouter une unité, il faut ajouter une équivalence entre cette unité et la nouvelle unité. Une équivalence est définie par une égalité avec d'un côté le nom d'une unité et de l'autre la valeur exprimée dans une autre unité. Le séparateur de décimal est le point « . ».

Par exemple, si on veut ajouter l'unité tonne, on peut soit écrire :

- kg = 0.001 T ;
- soit T = 1000 kg, cette notation est préférable à la première écriture car elle est entière ;

```
T=1000 kg
```

Il est préférable d'utiliser l'écriture entière, notamment si la division ne tombe pas juste. Par exemple, pour l'équivalence entre jours et heures, on peut écrire :

- j = 24 h qui est préférable à h = 0.041666666 j

```
j=24 h
```

Il est également possible d'ajouter des traductions au libellé des unités qui apparaissent dans TRAC. Par exemple j.English=d (English est l'identifiant de la langue comme dans le fichier Langue.ini). Cela est utile lorsque le programme est utilisé dans une autre langue. Ainsi, dans sa version anglaise, TRAC affichera l'unité « j » (jour) en « d » (day) dans les listes déroulantes.

Enfin, il est possible d'ajouter des variantes du nom de l'unité :

```
j.FrançaisSingulier=jour
j.FrançaisPluriel=jours
j.AnglaisSingulier=day
j.AnglaisPluriel=days
```

Cela permet de reconnaitre le nom de l'unité lors d'une importation de fichier texte ou CSV dans l'en-tête du fichier. Si l'en-tête du fichier de données temps et concentration à importer contient le terme j, jour, ou jours, l'unité de temps sera automatiquement affecté à jours. Ces variantes ne sont pas affichées dans l'interface de TRAC et le nom FrançaisSingulier, AnglaisPluriel etc. est libre. Voici un extrait de fichier *.csv importé permettant une reconnaissance automatique des unités :

```
Temps (jours)     Concentration (g/L)
0     0.00E+00
22    0.00E+00
41.8  0.00E+00
62.2  0.00E+00
498.2 1.66E-06
516.4 2.02E-06
536.2 2.93E-06
555.6 3.63E-06
575   4.37E-06
596.2 5.52E-06
```

Les autres fichiers initialisation ne présentent pas d'intérêt à être modifié et ne doivent pas l'être.

Trac un projet collaboratif et évolutif

TRAC est un outil gratuit et diffusable facilement. Il dispose de multiples fonctionnalités lui permettant de s'adapter à différents contextes :

- il est fourni avec une interface de traduction afin de permettre la traduction de TRAC dans d'autres langues et de faciliter son utilisation dans d'autres pays ;
- il est possible de modifier et d'ajouter facilement d'autres unités que celles du système international, ainsi il peut s'adapter à différents contextes ;
- il est possible d'ajouter ses propres solutions analytiques, ce qui permet aux utilisateurs des usages dans différents contextes.

L'ensemble des utilisateurs de TRAC peut ainsi partager ses apports et concourir à étoffer l'outil et élargir son domaine d'utilisation. Les apports de chacun pourront s'ils le souhaitent être intégrés à TRAC après validation du contenu ou proposés en téléchargement sur le site web du projet : http://trac.brgm.fr.

Pour partager une nouvelle traduction il suffit d'envoyer via le formulaire de contact du site web de TRAC le fichier correspondant :

- Traduction : pour partager une nouvelle traduction le fichier « Langue.ini » ;
- Unités : pour partager de nouvelles unités le fichier « Unites.ini » ;
- Solutions : pour partager des solutions le fichier « MesFormules.ini »

2.3. SIMULER ET DIMENSIONNER UN TRAÇAGE

Le mode « Simulation » est une utilisation directe (« forward modelling » en anglais) du logiciel. Il permet de simuler le transport d'un élément selon une configuration de traçage définie par le choix d'une solution analytique. Après avoir sélectionné une solution et défini les paramètres associés (masse de traceur injecté, vitesse réelle d'écoulement, épaisseur de l'aquifère, …) la courbe de concentration calculée est affichée dans la fenêtre graphique. Il est possible d'en ajouter plusieurs et de modifier leurs paramètres respectifs afin de tester différentes configurations (Illustration 12). Sur la base de cette simulation, il est ensuite possible de définir la masse optimale de traceur à injecter pour un essai de traçage ainsi que la fréquence d'échantillonnage des prélèvements en eau.

Le mode « simulation et dimensionnement » est constitué de 3 onglets organisés par ordre logique d'utilisation.

2.3.1. Dossier

L'onglet « Dossier » est constitué d'une barre d'outils couvrant les fonctions :

- Nouveau (Ctrl+n) : crée un nouveau dossier TRAC (un dossier TRAC correspond à un fichier d'extension *.trac contenant toutes les informations saisies dans TRAC) ;
- Ouvrir (Ctrl+o) : permet d'ouvrir un dossier existant ;
- Enregistrer (Ctrl+s) : permet d'enregistrer le dossier actuel ;
- Enregistrer-sous (Ctrl+e) : permet d'enregistrer le dossier actuel sous un autre nom ;
- Liste des dossiers *.trac récents (Ctrl+L) : permet d'afficher la liste des dossiers récemment ouverts et de les charger.

L'onglet « Dossier » permet de renseigner des informations :

- sur le contexte du traçage (nom de l'essai, date, département, commune, lieu-dit ainsi qu'un champ libre commentaire) qui sont repris pour partie dans la feuille de synthèse ;
- d'ordre technique tel que le traceur utilisé, la masse injectée et la distance au point de restitution. Ces deux derniers paramètres peuvent par la suite être automatiquement importés dans l'onglet « Paramètres ».

2.3.2. Formule

L'onglet **« Formule »** permet la sélection d'une formulation analytique adaptée au problème de transport.

Par défaut (c'est-à-dire en mode « Simple »), un panel de quelques solutions analytiques permettant de résoudre des problèmes fréquents de transport est proposé. Un click sur le bouton « Mode Avancé » (Ctrl+u) permet d'afficher en plus des solutions précédentes un panel de solutions analytiques plus complexes.

Il est possible de filtrer les solutions analytiques selon les 3 critères suivants :

- « Dimensions » : selon la géométrie de l'écoulement (1D, 2D, 3D, radial) ;
- « Injection » : injection brève ou instantanée (de type Dirac), continue ou par paliers de concentrations (les solutions en injection continue permettent par utilisation du principe de superposition de réaliser des injections par paliers de concentrations) ;
- « Dispersivité » : solutions analytiques intégrant une dispersivité constante ou variable (selon la distance de transport, permet la prise en compte de l'effet d'échelle). Actuellement, une seule solution intègre une dispersivité variable.

L'intitulé des solutions dans TRAC reprend leurs caractéristiques principales (Illustration 22) :

Dimension / Injection / Milieu / Dispersivité / Divers (masse injectée, concentration) et le numéro de la solution (cf. rapport de validation)

Exemple : 1D / Brève / Infini / Constante / Masse [01]

Un schéma associé au système de traçage est affiché ainsi que les noms des paramètres, les libellés et unités associés et l'auteur de la solution (référence bibliographique).

Une fois la solution sélectionnée, les onglets « Paramètres » et « Dimensionnement » deviennent accessibles.

Les formules présentées dans les versions 1.6 de Trac (1.6.4 étant la dernière à la fin du projet) ont été validées par comparaison avec d'autres moyens de calculs et/ou des modèles numériques. Le rapport de validation est le rapport BRGM-RP-59425-FR.

La plupart de ces formules sont exposées dans une publication soumise à European Physical Journal, reproduite en Annexe 3.

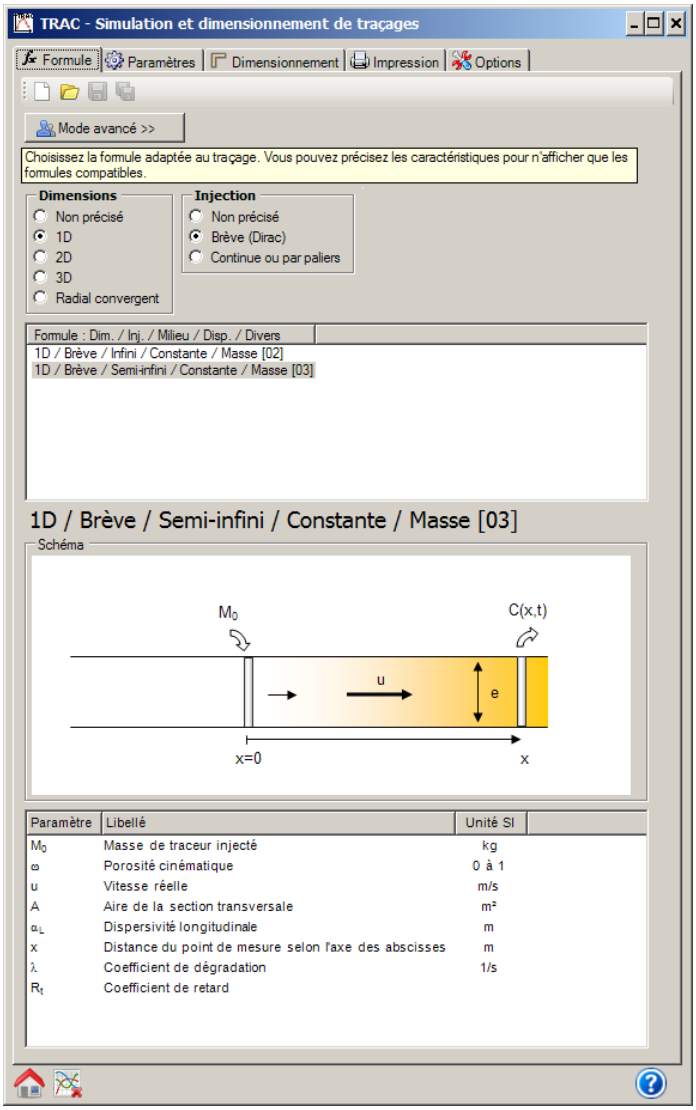


Illustration 22 : Mode « Simulation »

2.3.3. Paramètres

L'onglet **« Paramètres »** permet de définir les unités de la fenêtre graphique (temps et concentrations) et les paramètres associés à la solution analytique sélectionnée.

Les unités du graphique disponibles sont listées ci-dessous (le débit peut-être défini uniquement dans le mode « Interprétation ») :

Temps	**Concentration**	**Débit**
ms	ppq (partie par quadrillion $1x10^{-15}$)	L/s
s	ppt (partie par trillion $1x10^{-12}$)	L/h

mn
h
j
an

ppb (part per billion $1x10^{-6}$)
ppm (partie par millier $1x10^{-3}$)
g/m^3 ($1x10^{-6}$)
mg/L ($1x10^{-6}$)
g/L ($1x10^{-3}$)
kg/m^3 ($1x10^{-3}$)
kg/L ($1x10^{0}$)
mS/cm
S/m
Bq
u (unité ?)
Ku
Mu
Gu

m^3/s
m^3/h

Volume du puits et concentration d'injection

L'option « $\sqrt{x}$ Calculer le volume du puits » est disponible pour les solutions dont l'injection est réalisée via le paramètre concentration. Elle permet d'estimer la concentration d'injection du traceur d'après la masse injectée et le volume d'eau dans le puits. Une fois calculée, cette concentration est directement affectée au paramètre « Concentration initiale (C_0) » (Illustration 23).

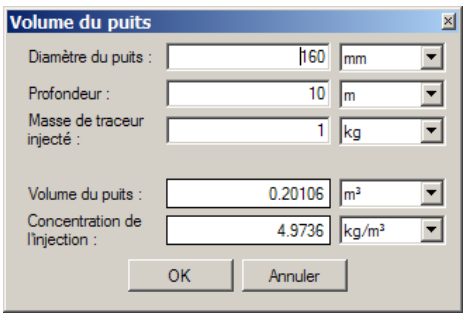


Illustration 23 : Calcul du volume du puits

Injection par paliers de concentration

En pratique, il est impossible de réaliser une injection « instantanée » dans un essai de traçage. On peut néanmoins considérer raisonnablement que cette hypothèse est valide lorsque la durée de l'injection est négligeable devant celle des temps d'arrivée du traceur au point d'observation.

Si cette hypothèse n'est pas valide, on doit interpréter l'essai de traçage avec une solution analytique tenant compte de la durée d'injection du traceur. En faisant appel au principe de superposition, on peut développer une solution analytique adaptée à

partir d'une solution analytique prévue pour une injection continue à concentration constante.

Les solutions analytiques dont l'injection est continue peuvent être utilisées pour simuler une injection par paliers de concentration. Pour cela, activer l'option « Injection par paliers », permet d'accéder au bouton « Définir les paliers ».

La fenêtre « Injection par paliers de concentration » est constituée des onglets « Unités » et « Définition des paliers ». Une zone graphique au-dessous permet de représenter schématiquement l'injection par paliers de concentration.

L'onglet « Unités » permet de définir des unités de temps et de concentration des paliers, qui peuvent, afin de faciliter la définition de ces derniers, être différentes de celles du graphique,.

L'onglet « Définition des paliers » permet de saisir le temps d'injection depuis le temps initial (la durée d'injection est calculée automatiquement) et la concentration d'injection des paliers (Illustration 24). La dernière injection est suivi d'une injection à concentration nulle.

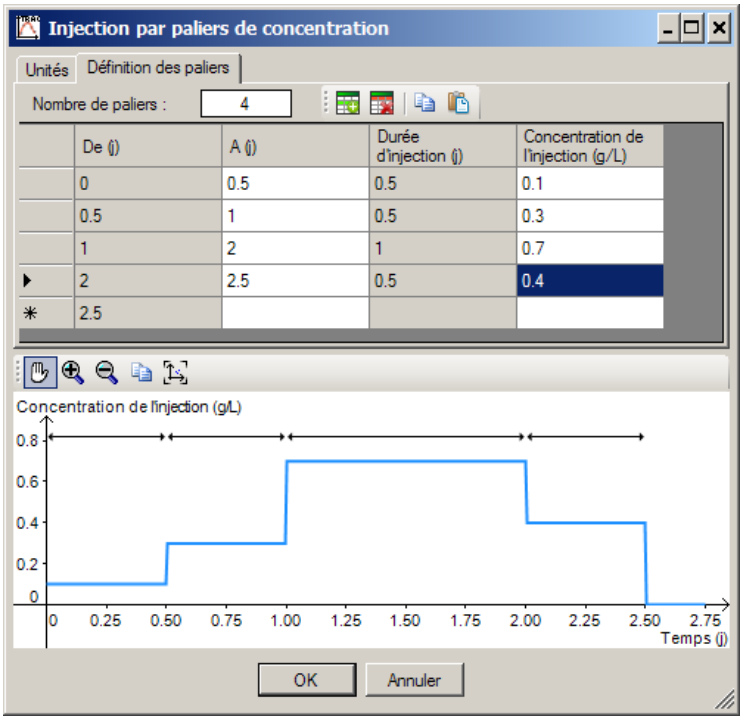


Illustration 24 : Exemple d'injection par paliers de concentration

Paramètre : unité, conversion et bornes

Chaque paramètre associé à la solution (Illustration 25, zone [1]) doit être défini (sauf mention « optionnel »).Il est possible d'effectuer une conversion d'une unité au choix de l'utilisateur vers l'unité SI en vigueur (Illustration 25, zone [2]), et de faire varier la valeur du paramètre selon des bornes définies (Illustration 25, zone [3]).

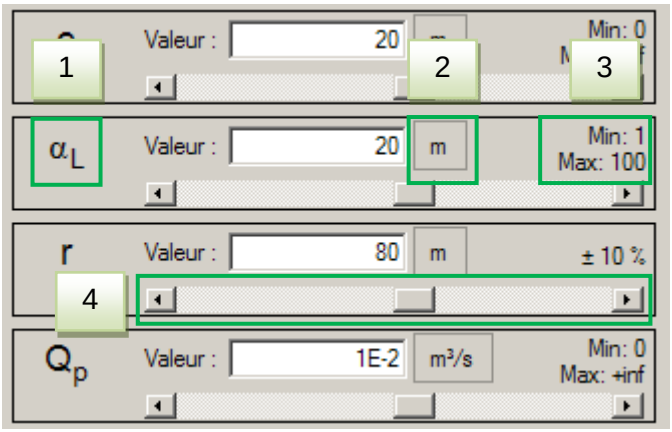


Illustration 25 : Champ paramètre

Pour saisir l'unité du débit exprimée en unité SI (m^3/s) dans une unité plus pratique (m^3/h), il suffit de cliquer sur l'unité pour faire apparaître la fenêtre de conversion (Illustration 26). Saisir la valeur et l'unité correspondante puis valider par OK. L'exemple ci-dessous converti le débit donnée de 1 m^3/h en m^3/s (unité SI) et l'affecte à la valeur du paramètre.

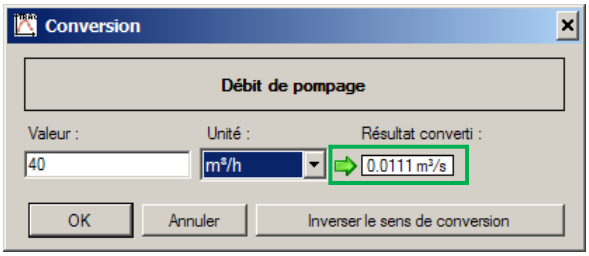


Illustration 26 : Converstion d'unité

L'option « Inverser le sens de conversion » permet, à l'inverse, de convertir la valeur donnée dans le champ « Résultat converti : » en unité SI (m^3/s) dans l'unité de votre choix. Le résultat est renvoyé dans le champ valeur. La flèche de couleur verte s'inverse pour indiquer le sens de conversion.

Après avoir défini la valeur d'un paramètre il est possible de spécifier sa plage de variation minimale et maximale. Ces bornes sont utilisées par l'intermédiaire de l'ascenceur horizontal (Illustration 25, zone [4]). Les bornes peuvent être définies, soit :

- de manière relative, sous la forme d'un pourcentage de la valeur saisie, par exemple 1 kg ± 100 %. La plage de variation sera de 0 à 2 kg ;
- de manière fixe, exemple de 0 à 2 kg ;
- par défaut (pourcentage ou borne relative) tel que défini dans le fichier Bornes.ini (décrit plus loin).

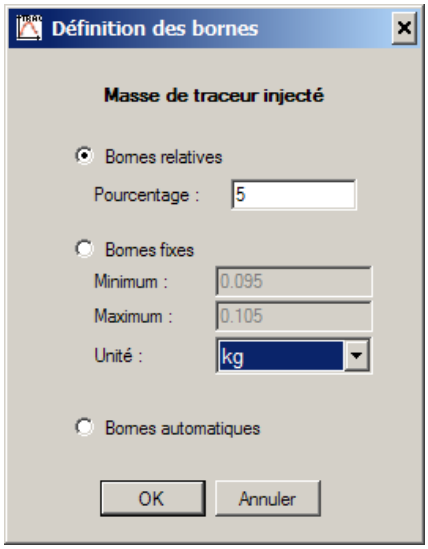


Illustration 27 : Définition des bornes des paramètres

Les paramètres facultatifs (par exemple, dégradation du soluté durant le transport, facteur de retard) sont signalés par la mention 'optionnel'. Une fois tous les paramètres nécessaires saisis, la courbe de concentration est calculée et apparaît automatiquement dans la fenêtre graphique (Illustration 12) (Ctrl+g). Lorsqu'un paramètre est modifié, le graphique est automatiquement mis à jour.

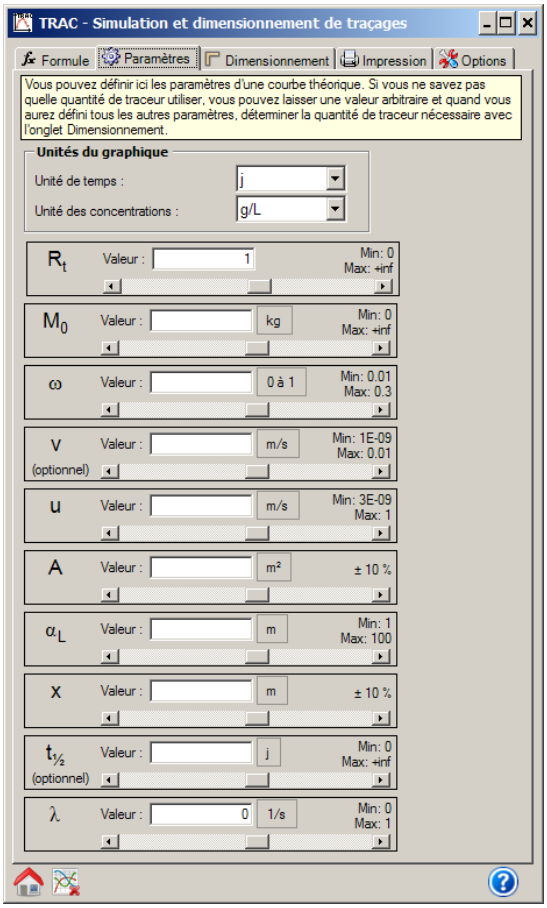


Illustration 28 : Onglet « Paramètres »

2.3.4. Dimensionnement

L'onglet « Dimensionnement » permet d'établir, sur la base d'une simulation de traçage, la masse optimale de traceur à injecter ainsi que la fréquence d'échantillonnage.

Détermination de la masse de traceur à injecter

Sur la base de la simulation effectuée, il est possible de déterminer la masse de traceur à injecter de telle sorte à ce que la concentration espérée mesurée au point de restitution soit atteinte. Dans le champ « Détermination de la masse de traceur à injecter » définir la concentration attendue dans l'unité de votre choix. Le bouton « Déterminer » calcule la masse à injecter afin que la concentration maximale souhaitée soit atteinte, et affecte la valeur de la masse dans le champs « M_0 (masse) » de l'onglet « Paramètres » de la courbe sélectionnée. La courbe de restitution est recalculée avec le nouveau paramètre masse mis à jour.

Fréquence d'échantillonnage

Sur la base d'une simulation, cet outil permet de planifier les temps de prélèvements en eau pour la mesure des concentrations (Illustration 29). Le bouton « Déterminer » permet de définir automatiquement les temps des mesures. Le nombre de mesures par défaut est fixé arbitrairement à 30 et doit être adapté en conséquence. La date de première et dernière mesure est calculée différemment selon le type d'injection :

- Injection brève :
  - -Première mesure : 0.01 % de la masse
  - -Dernière mesure : 1 % de la concentration maximale
- Injection continue :
  - -Première mesure : 1 % de la concentration maximale
  - -Dernière mesure : il s'agit du temps pour lequel 99% de la concentration maximale est atteinte, temps auquel on ajoute la distance entre ce temps et le temps pour lequel 80% de ce 99% est atteint. Soit $t = t_{99\%} + (t_{99\%} - t_{72.2\%})$

Les mesures sont espacées à intervalles de temps régulier sur la durée totale de restitution du traceur.

Il est également possible de définir les temps de première et dernière mesure, ainsi que l'espacement des mesures (intervalle de temps entre deux mesures) ou bien le nombre de mesures souhaitées (l'intervalle de temps étant dans ce cas automatiquement calculé). Il est aussi possible de discrétiser les mesures à réaliser en fonction de la variation de la concentration, par exemple dès que la concentration varie de x µg/L.

Le tableau de valeurs avec les temps de mesures peut ensuite être copié dans le presse-papier pour une copie vers un tableur (Excel, OpenOffice) ou bien être exporté sous forme de fichier *.txt ou *.csv.

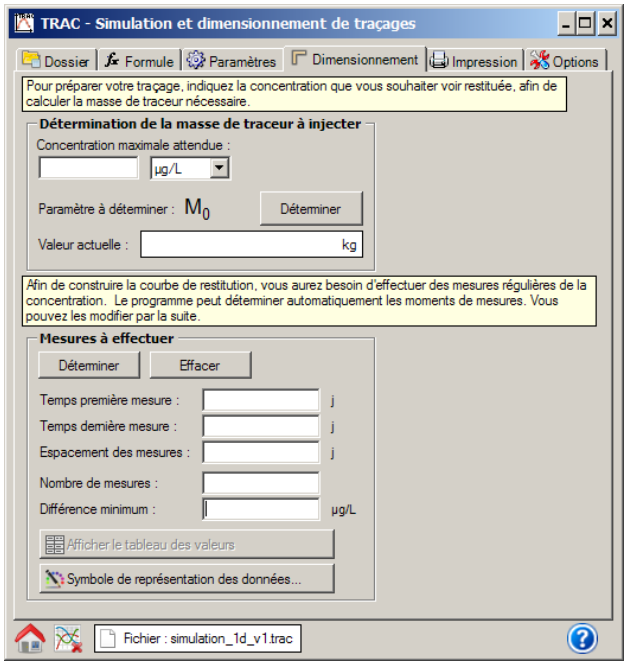


Illustration 29 : Onglet « Dimensionnement »

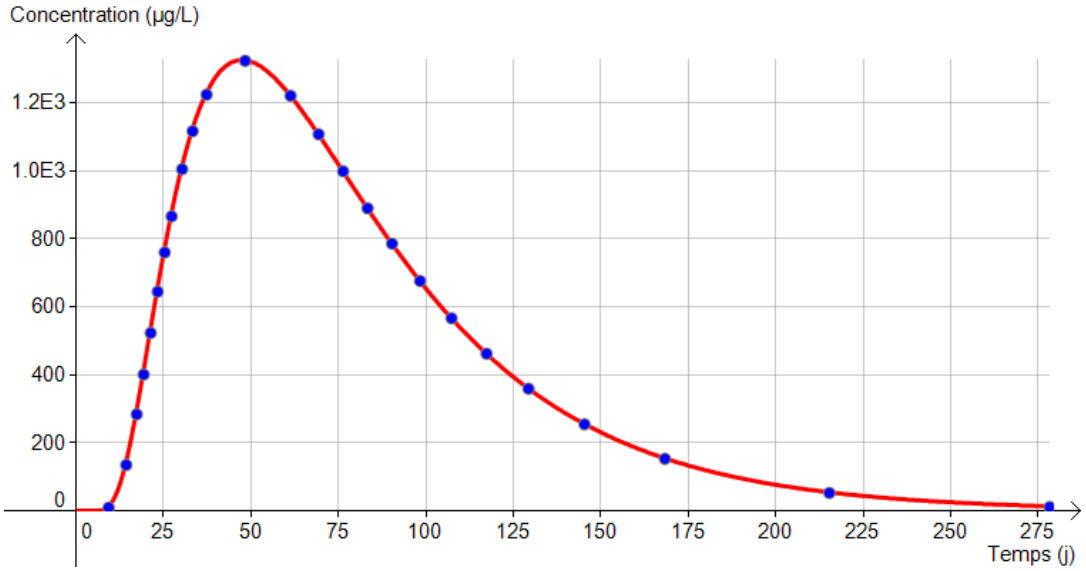


Illustration 30 : Exemple de fréquence d'échantillonnage en concentration (Δc=100 µg/L)

2.4. INTERPRETER UN TRAÇAGE

Le mode « Interprétation de traçages » permet comme son nom l'indique d'interpréter un test de traçage à l'aide de différentes solutions analytiques par ajustement des paramètres de la solution et comparaison avec les données d'observation. Ce mode est constitué de 4 onglets organisés dans l'ordre logique de leur utilisation :

- Dossier : permet de renseigner des informations contextuelles sur l'essai de traçage (date, lieu, opérateur) et techniques (traceur, masse de traceur injecté) qui sont reprises dans l'impression de la fiche de synthèse de l'essai de traçage ;

- Données : permet d'importer (fichier *.csv) ou de saisir des mesures expérimentales (temps, concentration, débit), d'effectuer divers traitements (filtrage des données, soustraction d'un bruit de fond, décalage en temps des données expérimentales) et de définir les unités des données expérimentales et de la fenêtre graphique ;

- Formule : permet de sélectionner une solution analytique pour interpréter l'essai de traçage (cet onglet, commun avec le mode « Simulation » y est décrit dans le chapitre éponyme). L'onglet suivant « Paramètres » est accessible dès qu'une solution analytique a été sélectionnée ;

- Paramètres : après avoir sélectionné une solution analytique, cet onglet permet d'en définir les paramètres connus (masse injectée, distance point d'injection-restitution) et d'estimer les paramètres hydrodispersifs par comparaison entre la courbe de concentration simulée (théorique) et observée (expérimentale) ;

- Impression et Options sont communs avec le mode « Simulation », ils sont décrits dans le chapitre ad'hoc.

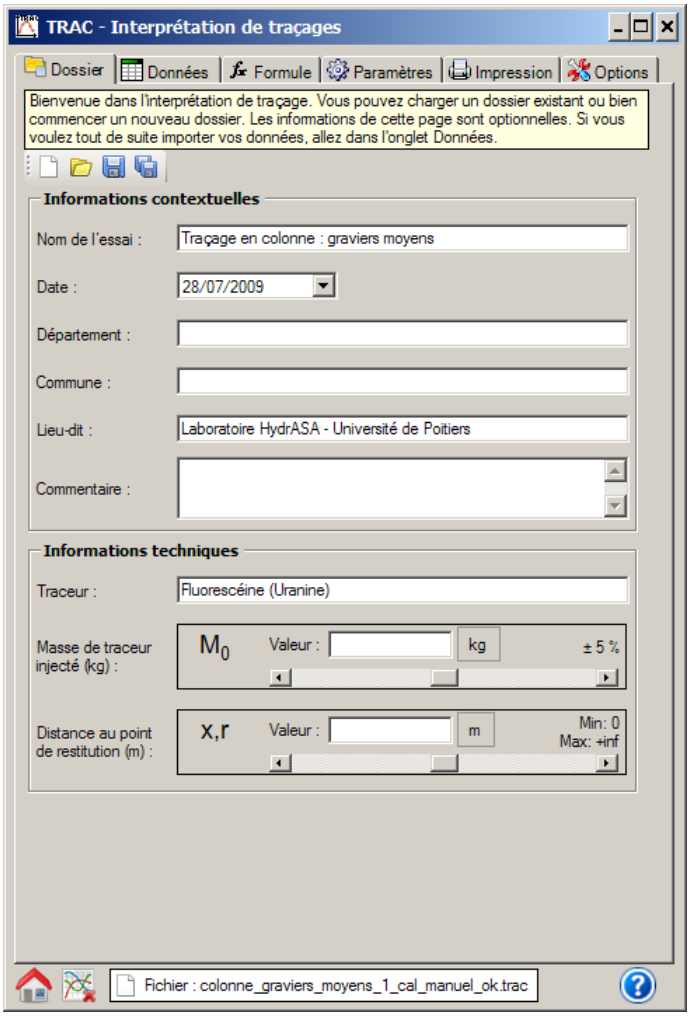
Dossier

L'onglet « Dossier » est constitué d'une barre d'outils couvrant les fonctions :

- Nouveau (Ctrl+n) : crée un nouveau dossier (dossier trac = fichier *.trac) ;
- Ouvrir (Ctrl+o) : permet d'ouvrir un dossier existant ;
- Enregistrer (Ctrl+s) : permet d'enregistrer le dossier actuel ;
- Enregistrer-sous (Ctrl+e) : permet d'enregistrer le dossier actuel sous un autre nom ;
- Liste des dossiers *.trac récents (Ctrl+L) : permet d'afficher la liste des dossiers récemment ouverts et de les charger.

L'onglet Dossier permet de renseigner des informations :

- sur le contexte du traçage (nom de l'essai, date, département, commune, lieu-dit ainsi qu'un champ commentaire) qui sont repris pour partie dans la feuille de synthèse ;
- d'ordre technique tel que le traceur utilisé, la masse injectée et la distance au point de restitution. Ces deux derniers paramètres peuvent être automatiquement importés dans l'onglet « Paramètres ».



Données

Une fois les informations de l'essai de traçage saisies dans l'onglet « Dossier », l'onglet « Données » permet d'importer les données de l'essai de traçage (temps, concentration, éventuellement débit). On trouve les boutons suivants (Illustration 31) :

- Importer : permet d'importer un fichier de données de traçages (*.txt, *.csv), les données doivent être séparées par un séparateur (tabulation, espace, point virgule, …). Les colonnes doivent être dans l'ordre suivant : temps, concentration, débit. La colonne débit étant optionnelle. L'en-tête de colonne

est également optionnel, mais il est recommandé pour spécifier l'unité utilisée. Il est possible d'écrire l'en-tête de deux façons : soit l'unité est utilisée comme titre de la colonne, soit l'unité est exprimée entre parenthèse après le nom de la colonne. Des exemples sont donnés par la suite dans le tutoriel ;

- Saisir / Editer : permet de saisir directement des données de traçage dans un tableur, d'éditer des données importées précédemment, ou bien de saisir les données manuellement via un tableur ou de copier-coller les données directement depuis un tableur (Excel, OpenOffice) vers le tableur de TRAC ;
- Aucune (simulation pure) : permet d'effacer les données importées afin d'effectuer une simulation sans données d'observation (revient en quelque sorte à utiliser le mode simulation) ;
- Bruit de fond à retrancher (dans l'unité de la concentration définie ci-dessous) : permet de retrancher un bruit de fond à la concentration des points expérimentaux.

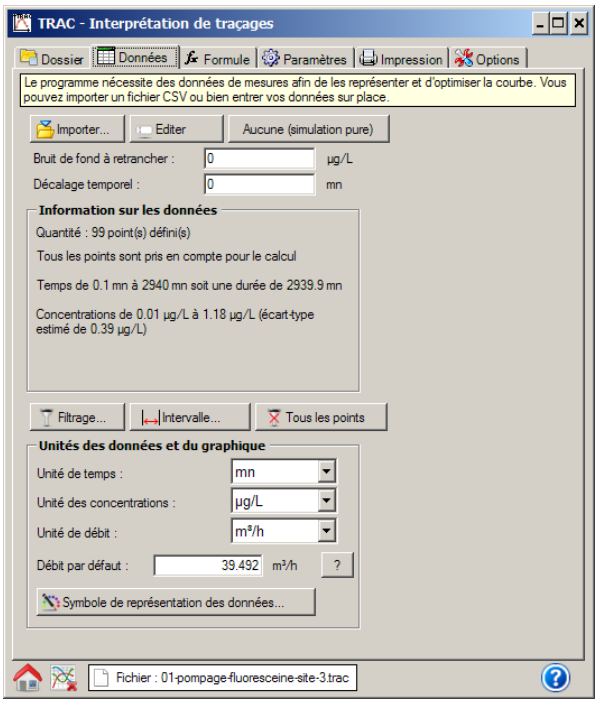


Illustration 31 : Onglet Données

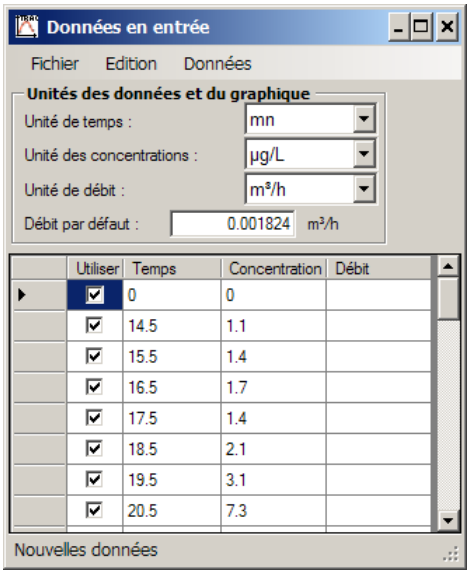


Illustration 32 : Import / Saisie des données

L'encart « Informations sur les données » renseigne le nombre de données saisies ou importées par l'utilisateur ainsi que les minima et maxima en temps et en concentration.

Les boutons suivants permettent de filtrer les données afin de ne conserver qu'une partie de ces points, utile notamment pour l'optimisation des paramètres :

- Filtrage (Illustration 34) : permet de filtrer les données importées, selon le temps, la concentration, le débit ou les trois paramètres à la fois ;
- Intervalle : permet de sélectionner via la fenêtre graphique (Illustration 33) les points à conserver et qui seront utilisés dans le processus d'optimisation des paramètres. Une fois le bouton intervalle actionné, déplacez le curseur sur la fenêtre graphique et cliquer une fois pour démarrer la sélection au un temps t_1 et une deuxième fois pour arrêter l'étendue de la sélection à un temps t_2 ($t_1<t_2$) ;
- Tous les points : annule les filtres éventuellement utilisés et conserve toutes les données (tous les points).

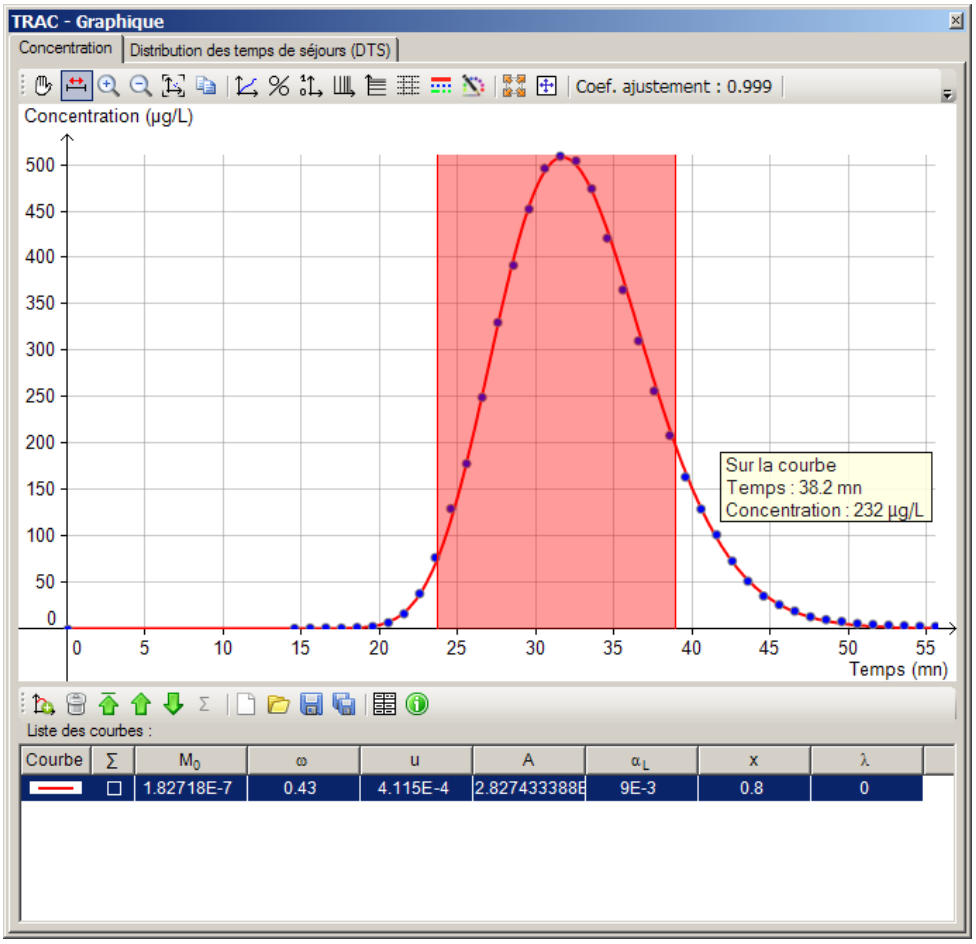


Illustration 33 : Sélection des données selon un intervalle de temps

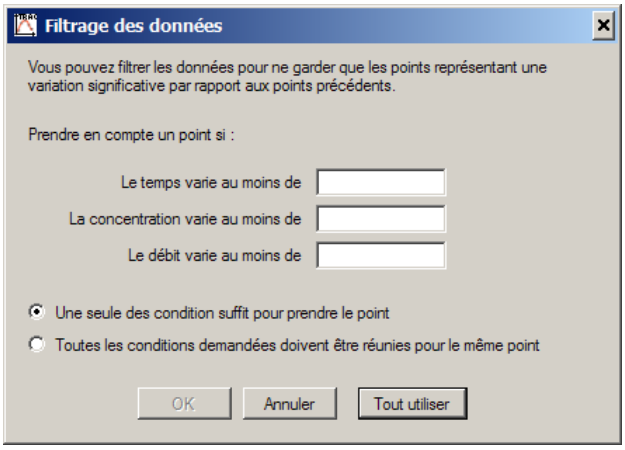


Illustration 34 : Filtrage des données

L'encart « Unités des données et du graphique » permet de définir les unités de temps, concentration et débit, automatiquement reconnues si vous avez importé vos données

via un fichier CSV avec les unités dans en-tête du fichier. Le champ « Débit par défaut » permet de définir un débit par défaut pour les points sans débit connu ou spécifié. Enfin, le bouton « Symbole de représentation des données » permet de modifier l'apparence des points d'observations (couleur des points actifs et inactifs, taille et forme) en temps réel.

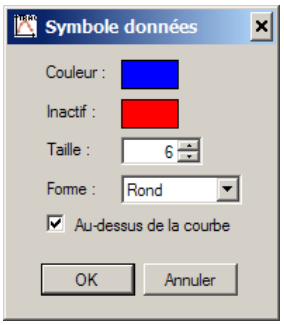


Illustration 35 : Symbole des données

Formule

L'onglet « Formule » permettant de sélectionner une solution analytique au problème de transport à traiter est décrit dans le chapitre précédent « 2.3 Simuler et dimensionner un traçage ».

Paramètres

L'onglet « Paramètres » permet de définir les paramètres afférents à la solution analytique sélectionnée. Cet onglet est décrit au chapitre précédent « 2.3 Simuler et dimensionner un traçage ».

La principale différence avec l'onglet « Paramètres » présenté dans le mode simulation concerne le calage automatique des paramètres. Les boutons suivants font leur apparition :

- (Dé)cocher tout : permet de cocher/décocher tous les paramètres, les paramètres cochés seront utilisés pour le calage/l'optimisation ;
- Appliquer les paramètres du dossier : permet d'appliquer les paramètres défini dans l'onglet dossier aux paramètres de la solution : la distance injection-restitution et la masse de traceur injectée ;
- Caler la courbe en ajustant les paramètres (F4) : permet un ajustement automatique des paramètres de calage. La qualité du calage peut-être appréciée dans la fenêtre graphique :
    - soit visuellement, le calage est jugé selon que les points d'observations sont plus ou moins superposés à la courbe théorique ;
    - soit par l'intermédiaire d'un critère mathématique, le coefficient d'ajustement de Nash-Sutcliffe dans la fenêtre graphique, exprimé par :

$F = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}\left(X_{obs}^{i} - X_{sim}^{i}\right)^2}{\sum_{i=1}^{n}\left(X_{obs}^{i} - \overline{X_{obs}}\right)^2}$ (ce qui correspond en réalité à l'écart moyen au carré, entre l'observation et le modèle, divisé par la variance des observations). L'ajustement est d'autant meilleur que le critère tend vers 1 ;

- Ignorer les bornes relatives : permet d'ignorer les bornes exprimées de manière relative dans le processus de calage des paramètres. Pour réactiver les bornes relatives d'un paramètre, il est nécessaire de les saisir à nouveau.

Chaque paramètre en mode interprétation est doté d'une case à cocher. Les paramètres sélectionnés sont intégrés au processus d'optimisation (chaque paramètre est variable dans la limite définie par ses bornes). Ainsi, si l'on souhaite faire varier les paramètres hydrodispersifs, on cochera la vitesse réelle u, et la dispersivité alpha.

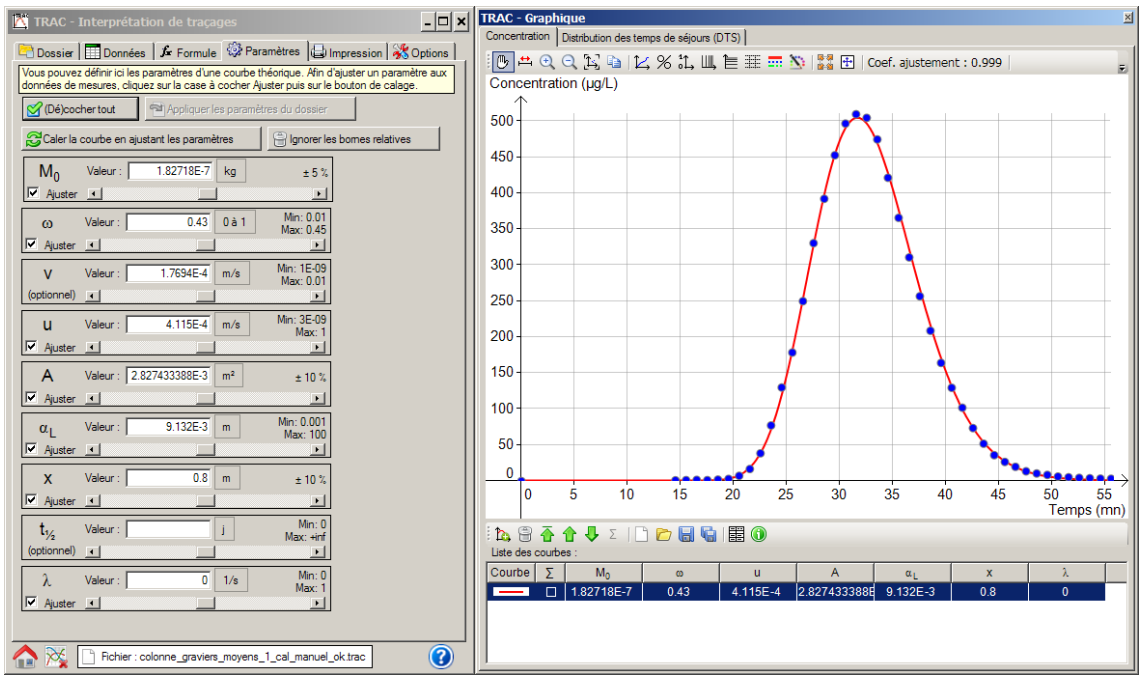


Illustration 36 : Mode interprétation, exemple d'ajustement automatique

3. Tutoriels : exemples d'application

Afin de faciliter la prise en main et l'utilisation de TRAC, plusieurs exemples sont proposés afin de traiter de cas pratiques. Les fichiers utilisés au cours de ces exemples sont fournis avec TRAC, dans le répertoire « utilisateur » (Mes Documents\TRAC). La première partie présente quelques exemples d'interprétation de traçages (approche inverse), la deuxième présente succinctement comment utiliser TRAC pour dimensionner un traçage (approche directe).

3.1. INTERPRETATION D'UN TRAÇAGE

3.1.1. Essais de traçages en colonne au laboratoire

Les traçages artificiels en colonne ont pour but de caractériser les propriétés intrinsèques d'un milieu. Ce milieu peut être constitué de matériaux naturels prélevés sur sites d'études ou bien de matériaux artificiels (billes de verre, graviers calibrés). Ce type d'expérimentation consiste à injecter dans le milieu un traceur naturel ou artificiel et à en suivre la restitution au niveau d'un ou plusieurs points d'observation.

Différents traçages ont été effectués en laboratoire dans des colonnes afin de caractériser les propriétés de transport de 4 matériaux : billes de verre, graviers moyens, graviers gros et un mélange de 25 % de graviers gros et 75 % de graviers moyens.

Plusieurs essais de traçages artificiels ont été réalisés pour chaque matériau en faisant notamment varier le débit imposé et la masse de traceur injecté. Les caractéristiques des colonnes (diamètre et longueur) sont également différentes d'un essai à l'autre.

Le traceur sélectionné pour ces essais est un traceur fluorescent, la fluorescéine (uranine). Ce dernier est peu coûteux, faiblement adsorbé, non toxique et sa la limite de détection est très basse. La concentration des solutions injectées est inconnue et sera donc déterminée au cours de l'interprétation.

Il est proposé d'interpréter un essai de traçage en colonne parmi les 26 jeux de données disponibles dans TRAC. Les essais de traçage suivants ont été réalisés en colonne :

- 7 essais avec le matériau billes de verre ;
- 9 essais avec le matériau graviers moyens ;
- 3 essais avec le matériau constitué d'un mélange de 25 % de graviers moyens et 75 % de graviers gros ;
- 6 essais avec le matériau graviers gros ;

Mode opératoire

Le matériau étudié est introduit dans une colonne en plastique, réparti de manière homogène. Les dimensions de la colonne (diamètre et hauteur), la densité du matériau et sa masse (g) sont mesurés. La circulation de l'eau se fait du bas vers le haut de la colonne. Le débit est ajusté à l'aide d'un variateur sur une pompe péristaltique. Il est estimé en mesurant le volume d'eau sortant de la colonne rapporté au temps. L'injection du traceur, effectuée à l'aide d'une seringue, est faite en bas de la colonne, la pointe de l'aiguille étant placée au centre de la colonne. Le volume de traceur injecté est estimé par pesée (différence de masse entre la seringue pleine et vide). Les prélèvements d'eau sont effectués après circulation en sortie de colonne. Ces échantillons sont prélevés à intervalles de temps constants (mais variables selon les expériences) et sont ensuite passés au fluorimètre afin de mesurer la concentration en traceur (la limite de détection de l'appareil est de 1 µg/L).

Schéma de traçage

L'essai sélectionné pour l'interprétation est la colonne de graviers moyens, dont les caractéristiques sont les suivantes (elles peuvent varier selon l'expérimentateur qui réalise les mesures, Illustration 37) :

diamètre =	6	cm
longueur =	80	cm
volume calculé (V) =	2262	cm^3
masse du matériau (m) =	3161	g
densité du matériau (d) =	2.6621	-
débit imposé (Q) =	30.4	cm^3/min

Illustration 37 : Caractéristiques de la colonne

La porosité totale peut-être estimée : $\omega_t = 1 - \left(\frac{\frac{m}{d}}{V}\right)$ = 47.50 %. Les données expérimentales (temps, concentration) sont présentées ci-dessous (Illustration 38).

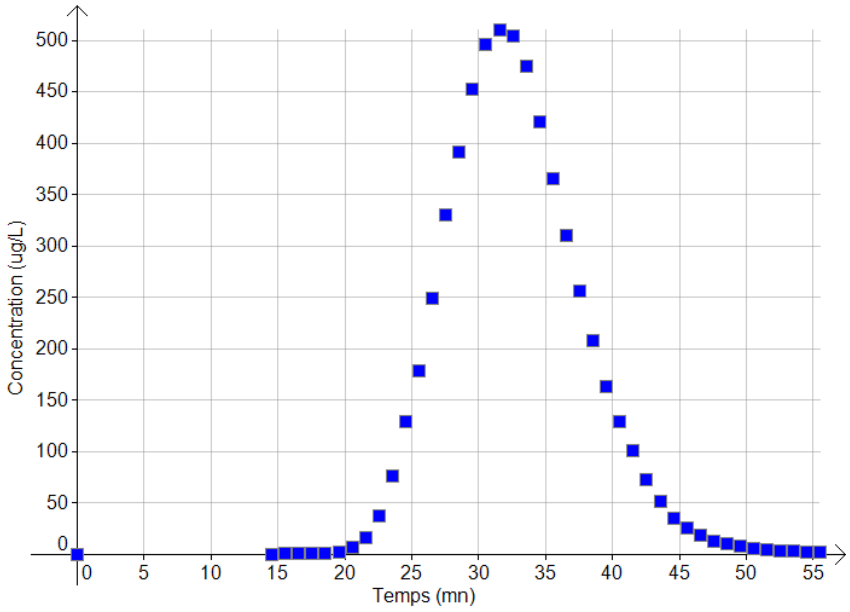


Illustration 38 : Resitution du traceur

Résolution analytique

L'interprétation de l'essai et des paramètres hydrodispersifs est réalisée par comparaison des résultats expérimentaux (Illustration 38) avec ceux d'une solution analytique répondant au problème de transport. Le choix d'une telle solution est fonction du système de traçage et des hypothèses posées :

- L'écoulement est unidimensionnel (1D) ;
- Le milieu est homogène, par conséquent les vitesses sont uniformes ;
- Le milieu est semi-infini, le traceur ne se diffuse pas en amont du point d'injection ;
- L'injection est instantanée, de faible durée devant le temps de transport ;
- On suppose que le traceur est parfait et que la restitution est totale (taux de restitution=100 %).

La solution analytique retenue est une solution en écoulement 1D avec injection brève (de type Dirac) en masse, dans un milieu semi-infini. Dans TRAC cette solution (n°03) est intitulée : « 1D / Brève / Semi-infini / Constante / Masse [03] De Vries (1973) ».

Procédure pour l'interprétation de l'essai :

- Démarrer TRAC (raccourci présent sur le bureau ou bien dans le menu « Démarrer », « Programme », « TRAC ») ;

- Sélectionner « Interpréter un traçage » ;

- Par défaut le premier onglet « Dossier » est sélectionné. Remplissez les informations contextuelles et techniques qui apparaissent telles que dans l'Illustration 39, ci-dessous. Ces informations figurent dans la feuille de synthèse, pour l'impression. Cet onglet vous permet à tout moment d'enregistrer votre dossier, d'en ouvrir un autre ou bien d'en crée un nouveau à l'aide des boutons « Sauvegarder », « Ouvrir » et « Nouveau ».

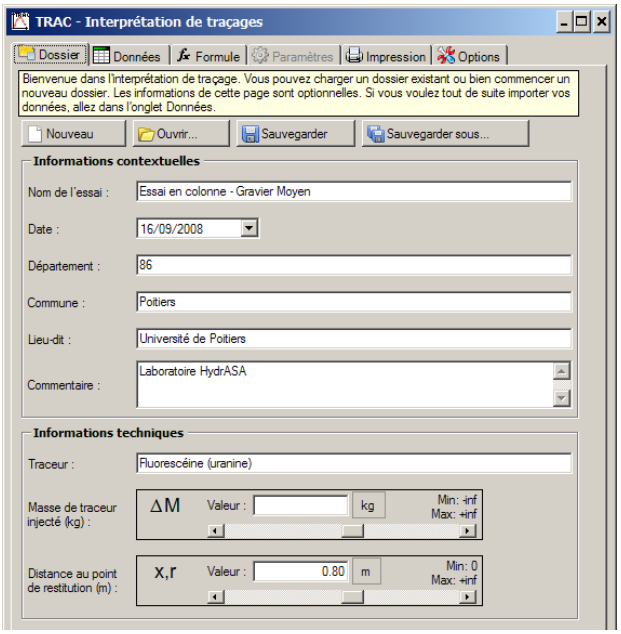


Illustration 39 : Onglet Dossier

- Une fois les informations du Dossier renseignées, cliquer sur l'onglet « Données ». Il permet de saisir ou d'importer des résultats expérimentaux (temps, concentration, débit). Cliquer sur le bouton « Importer » afin de charger le fichier contenant les données à importer « xp-7-colonne-graviers-moyens.csv ». Ce fichier se situe dans le répertoire utilisateur « Données ». Remarquez dans l'encart « Unités des données et du graphique » que les unités temps et concentration ont été reconnues automatiquement. Le bouton « Editer » permet de saisir, ajouter, supprimer ou modifier manuellement les données expérimentales ainsi que de modifier les unités des données. Une fois les données importées, les points sont affichés dans la fenêtre graphique. L'encart « Information sur les données » présente le nombre de points et la gamme de variations en temps et en concentration de la série importée. Par défaut, tous les points sont sélectionnés pour le calage par optimisation des paramètres lors l'interprétation. Il est possible de filtrer les données et de ne sélectionner qu'un intervalle de temps à interpréter (bouton « Filtrage » et « Intervalle »). Afin de calculer le taux restitution du traceur, il est nécessaire d'indiquer le débit imposé mesuré au cours de l'expérience, 30.4 cm^3/min, soit

$1.824x10^{-3}$ m^3/h. Après avoir importé des données et définie les unités, poursuivre sur l'onglet « Formule ».

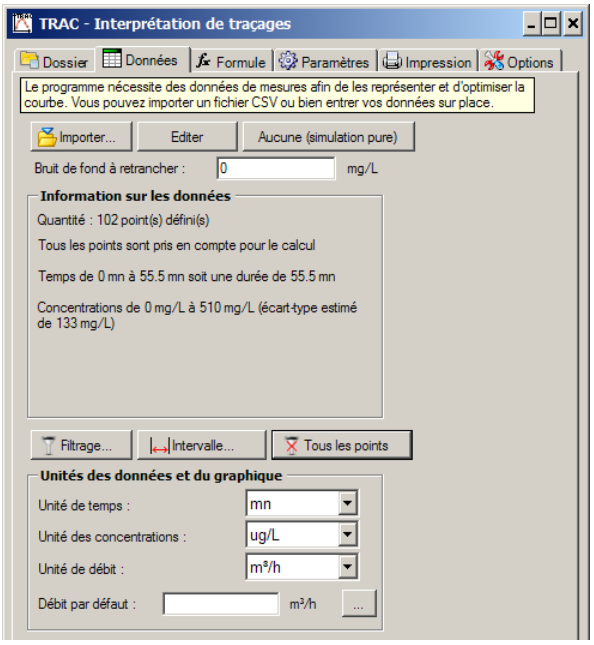
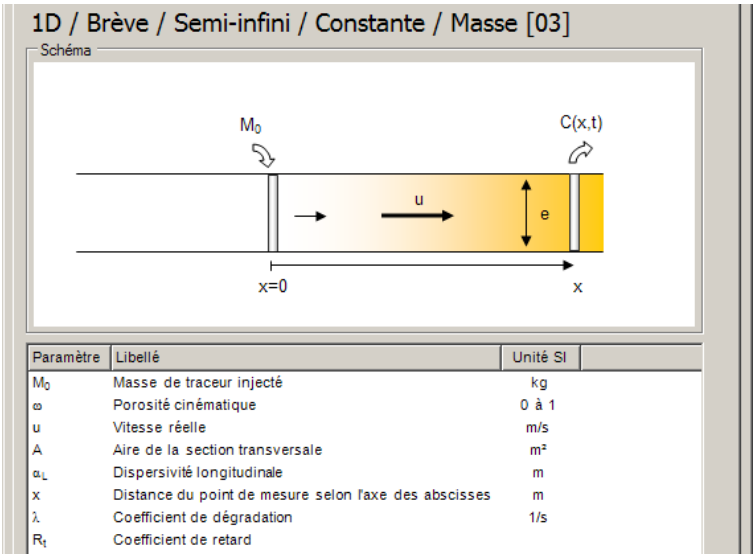


Illustration 40 : Onglet Données

- Par défaut, le « mode simple » est actif et présente seulement quelques solutions analytiques, cliquer sur le bouton « mode avancé » afin d'afficher toutes les solutions analytiques disponibles. Filtrer les solutions analytiques selon la dimension d'écoulement (1D) et le type d'injection (Brève (Dirac)). Parmi les deux solutions disponibles nous utilisons la solution dont le milieu est considéré semi-infini. La sélection d'une formule fait apparaître une représentation schématique du système de traçage et sous ce schéma les paramètres inhérents à cette solution. Cliquer à nouveau sur la solution pour basculer vers l'onglet « Paramètres » ou bien cliquer directement sur l'onglet « Paramètres ».



Paramètre	Libellé	Unité SI
M_0	Masse de traceur injecté	kg
ω	Porosité cinématique	0 à 1
u	Vitesse réelle	m/s
A	Aire de la section transversale	m²
α_L	Dispersivité longitudinale	m
x	Distance du point de mesure selon l'axe des abscisses	m
λ	Coefficient de dégradation	1/s
R_t	Coefficient de retard	

Illustration 41 : Onglet Formule

- L'onglet « Paramètres » vous permet de définir les paramètres de la solution. Il est conseillé de renseigner en premier lieu les paramètres connus et de définir leurs bornes de variations, qui seront utilisées dans le processus d'optimisation afin de faire varier les paramètres dans l'intervalle défini :

    - Distance de traçage « x » : 80 cm à saisir dans l'unité SI, les bornes sont définies de 0.75 à 0.85 (incertitude sur distance entre l'injection du traceur et le point de restitution) ;

    - Temps de demi-vie « $t_{1/2}$ »: la traceur n'est pas sujet à la désintégration, ce paramètre demeure non renseigné (champ vide ou valeur égale à zéro) ;

    - Masse de traceur injectée « M_0 » : la masse injectée est (volontairement) inconnue et est déterminée à partir des points expérimentaux, le débit étant supposé constant, la masse est estimée ainsi : $M_0 = Q \int_0^\infty C_{mesuré}(t)dt$. Sur la base des points expérimentaux (temps, concentration, débit) TRAC calcule l'aire sous la courbe et en déduit la masse restituée. La masse de traceur est affichée soit dans l'onglet « Données » soit dans la fenêtre graphique, au niveau de l'info-bulle « Masse restituée : M_r = xx kg / M_0 = … ». Soit M_0 = 182.718 µg, il est pratique d'utiliser le convertisseur d'unité en cliquant sur l'unité du paramètre (ici « kg »), ce qui donne 1.8718x10^{-7} kg, on définira une borne de ± 10 % ;

    - Porosité cinématique « ω_c » : la porosité totale (ω_t) est estimée à 0.47 %, la porosité cinématique $\omega_c = 1\text{-}(\frac{m/d}{V})$ (ω_c) est donc inférieure à

cette estimation, les borne sont définies entre 1 % et 50 %, ce paramètre devra ensuite être ajusté par essai/erreur ;

- Aire de la section d'écoulement « A » : $A = \pi r^2 = 28.27\ cm^2$, borne ± 10 % ;
- Vitesse de Darcy « v » : $v = \frac{Q}{A}$ =1.79197x10^{-4} m/s ;
- Vitesse réelle « u » : elle est calculée automatiquement par TRAC, $u = \frac{Q}{A\omega_c} = \frac{v}{\omega_c}$. Modifier ω_c ou v impact directement u et par conséquent la courbe de restitution ;

- Paramètres à estimer par essai/erreur :
  - Dispersivité « α_L » : c'est un paramètre de calage tout comme la vitesse et la porosité cinématique, il est estimé empiriquement (correspond à la taille de l'hétérogénéité) ou par essai/erreur, une valeur de 1 cm est retenue en première approche (modifier la borne minimale du paramètre à 0.001 m).

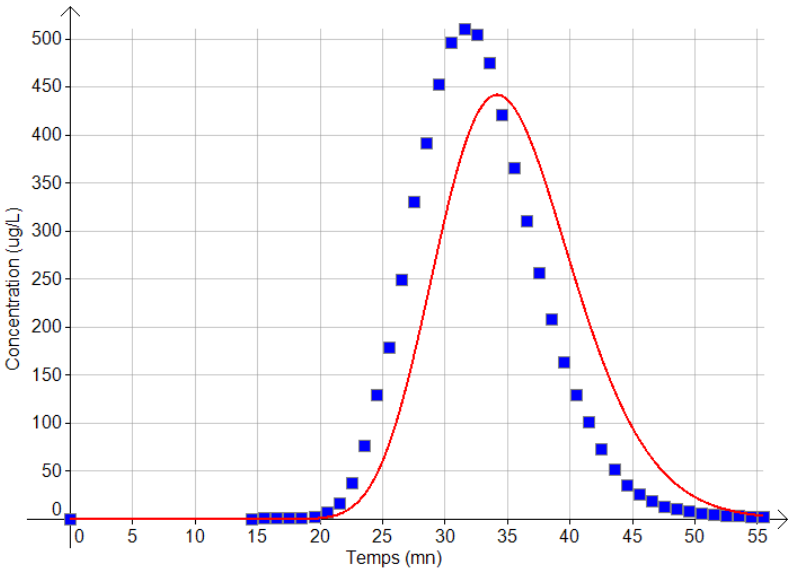


Illustration 42 : Ajustement de la courbe simulée

Cette approche empirique permet d'obtenir un premier résultat. Il est ensuite possible d'affiner le calage soit en modifiant manuellement les paramètres par essai/erreur soit par optimisation. Les deux procédures sont présentées ci-dessous.

Calage manuel des paramètres

Diminuer la porosité, de telle sorte à augmenter la concentration du pic simulé (courbe rouge) et qu'il corresponde au pic de concentration des points expérimentaux. Augmenter la vitesse de telle sorte à ce que le pic simulé soit décalé vers la gauche. Diminuer la dispersivité longitudinale et augmenter la porosité afin de superposer la phase de montée et de descente des deux courbes.

Calage automatique par optimisation des paramètres

La procédure de calage automatique tend à minimiser l'écart entre les observations ponctuelles et la courbe simulée. Le module d'optimisation est d'autant plus efficace que l'on est proche de la solution. L'optimisation peut utiliser un ou plusieurs paramètres simultanément, dans ce cas cocher les paramètres à ajuster. Chaque paramètre varie selon les bornes qui lui sont définies. Les paramètres connus du système (par exemple, la section transversale à l'écoulement) ne sont pas sujet à la calibration.

Dans un premier temps il est proposé d'ajuster la vitesse réelle seule afin de superposer sur l'axe des abscisses (temps) les points d'observations et la courbe simulée. Ajuster ensuite le seul paramètre porosité afin positionner les pics de concentration observés et simulés. Finalement ajuster seule la dispersivité afin de caler l'épanchement de la courbe simulée avec les observations. Le coefficient d'ajustement de Nash-Sutcliffe permet de qualifier le calage obtenu.

Des données biaisées peuvent rendre l'optimisation difficile, bien que dans le cas présent cela ne soit pas nécessaire, selon la qualité des données, il est possible d'effectuer un filtrage manuel ou automatique des données sur un ou plusieurs critères simultanément. A titre d'exemple si l'on souhaite au maximum 1 mesure par minute, on effectuera un filtre d'une minute sur le temps. Le bouton intervalle permet de sélectionner manuellement les points sur lesquels on souhaite focaliser l'optimisation. Le bouton tous les points permet à l'inverse de conserver tous les points pour l'optimisation (ce qui est le cas par défaut).

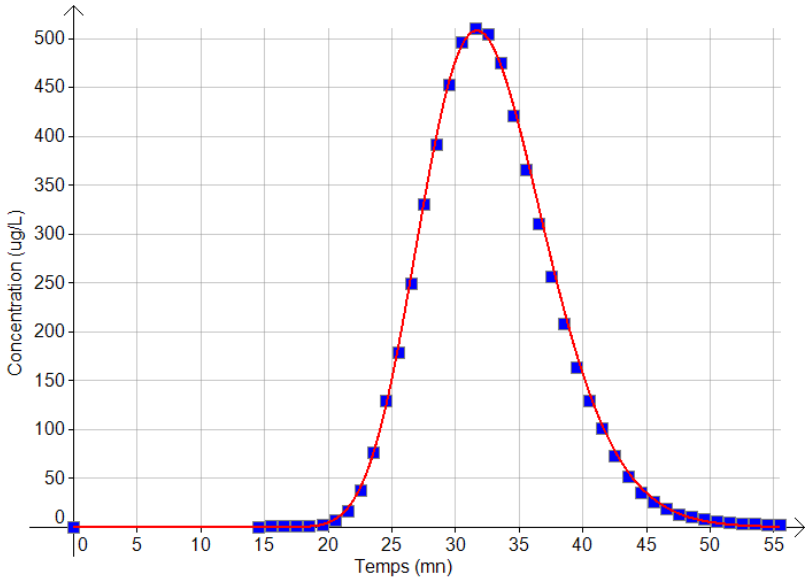


Illustration 43 : Résultat après calibration automatique

Résultats du calage

Les résultats de cet essai sont indiqués en bleu dans les tableaux ci-dessous. Il est intéressant de tester ce même essai en sélectionnant cette fois une solution analytique considérant un milieu infini. Le calage et les résultats sont nettement moins bons, d'où l'importance de l'adéquation de la solution avec le problème posé. A titre d'exercice et afin de tester différents cas et assimiler les étapes de calage et de l'interprétation, d'autres expériences de traçages en colonnes sont disponibles dans le répertoire Dossiers de TRAC. Les résultats sont donnés ci-dessous. Pour chaque matériau les valeurs de débit, vitesse, coefficient de dispersion, dispersivité et porosité cinématique sont synthétisées dans les tableaux ci-dessous (Illustration 44, Illustration 45, Illustration 46 et Illustration 47). Dans ces tableaux, les colonnes dans lesquelles figurent des croix correspondent à des expériences dont l'interprétation est rendue difficile compte tenues d'erreurs liées à l'expérimentation. Les caractéristiques moyennes des colonnes sont données en annexe 1.

Matériaux	Graviers moyens								
Expérience n°	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Q (cm3/min)	73.09	60.12	53.40	25.35	64.83	98.19	30.40	41.90	91.00
uc (cm/min)	5.88	4.71	4.21	2.43	6.44	9.55	2.41	3.31	6.78
D (cm2/min)	5.46	5.46	3.74	5.16	13.64	18.22	2.06	2.97	5.13
α (cm)	0.929	1.159	0.889	2.119	2.119	1.909	0.857	0.897	0.757
θc (%)	44	45	45	39	37	38	45	45	47

Illustration 44 : Résultats et paramètres de calage, graviers moyens

Matériaux	Graviers gros		
Expérience n°	10	11	12
Q (cm3/min)	35.80	84.01	50.64
uc (cm/min)	3.42	4.28	4.80
D (cm2/min)	6.88	9.16	10.09
α (cm)	2.010	2.141	2.101
θc (%)	40	74	40

Illustration 45 : Résultats et paramètres de calage, graviers gros

Matériaux	Mélange : 25 % graviers gros et 75 % graviers moyens						
Expérience n°	13	14	15	16	17	18	19
Q (cm3/min)	27.40	38.33	93.47	73.46	64.22	54.68	83.23
uc (cm/min)	3.42	4.69	12.21	8.92	8.03	6.83	10.53
D (cm2/min)	4.06	5.57	14.38	9.08	10.50	8.93	13.77
α (cm)	1.188	1.188	1.178	1.018	1.308	1.308	1.308
θc (%)	41	42	39	42	41	41	40

Illustration 46 : Résultats et paramètres de calage, mélange de 25% graviers gros et de 75% graviers moyens

Matériaux	Billes de verre						
Expérience n°	20	21	22	23	24	25	26
Q (cm3/min)	18.97	43.41	86.15	61.40	36.20	48.70	73.50
uc (cm/min)	1.83	4.15	8.27	5.74	3.45	4.69	7.10
D (cm2/min)	0.41	1.23	2.36	1.41	0.78	1.05	1.67
α (cm)	0.225	0.295	0.285	0.245	0.225	0.225	0.235
θc (%)	39	39	39	39	39	39	39

Illustration 47 : Résultats et paramètres de calage, billes de verre

Pour chaque matériau, les valeurs de dispersivité obtenues sont relativement homogènes, exception faite de certaines expériences où les écarts peuvent être liés à des erreurs de manipulation. Le tableau ci-dessous (Illustration 48) présente les paramètres moyens estimés à partir des essais.

Matériaux	Graviers moyens	Graviers gros	25 % graviers gros et 75 % graviers moyens	Billes de verre
α (cm)	0.915	2.056	1.214	0.248
θc (%)	45	40	41	39

Illustration 48 : Synthèse des paramètres hydrodispersifs

Interprétation

- **Porosité des matériaux**

La porosité totale, estimée à partir de la masse et de la densité de matériau remplissant le volume de la colonne, représente le volume total de vides dans la colonne. Ce volume est soit occupé par de l'eau en mouvement, dans ce cas on l'appelle porosité cinématique, soit par de l'eau stagnante (eau liée) dans les zones porales.

Le tableau suivant (Illustration 49) compare les valeurs de porosité totale et de porosité cinématique déduites des traçages.

Matériaux	Billes de verre	Graviers moyens	25 % graviers gros et 75 % graviers moyens	Graviers gros
θ_{totale} (%)	39	50	47	46
θc (%)	39	45	41	39
θc / θ_{totale} (%)	100	90	87	85

Illustration 49 : Comparaison de la porosité totale et de la porosité cinématique

On remarque que pour le matériau billes de verre, toute la porosité est efficace pour l'écoulement du traceur. La forme sphérique et surtout la dimension identique des billes induit une taille de pore maximale. On peut également supposer que les forces d'attraction moléculaire de ce matériau sont faibles (eau adsorbée).

Les graviers moyens présentent une porosité cinématique plus importante que les sables, probablement en raison du diamètre plus important des grains et de leur arrangement irrégulier dans l'espace. La porosité cinématique représente 90 % de la porosité totale.

Le mélange des graviers gros et moyens donne une porosité totale plus faible que les graviers moyens. Ceci peut s'expliquer par le fait que les graviers gros créent une

hétérogénéité dans le milieu ce qui a pour conséquence d'améliorer l'arrangement des grains et donc de diminuer la porosité.

Les graviers gros présentent une porosité totale du même ordre de grandeur que le mélange. Les graviers gros étant de même dimension leur arrangement est optimal. On constate que d'une manière générale la porosité cinématique représente une fraction de l'ordre de 90 % pour les trois matériaux constitués de graviers.

On remarque que plus le matériau utilisé est hétérogène et grossier, plus la porosité cinématique diffère de la porosité totale.

En effet, il existe de plus grandes fractions d'eau liées car les graviers gros se disposent de façon aléatoire dans les colonnes contrairement aux billes de verre (silice) qui s'agencent régulièrement du fait de leur forme sphérique.

- **Dispersivité des matériaux**

Le tableau ci-dessous (Illustration 50) est une synthèse des dispersivités des matériaux et du diamètre moyen des grains.

Matériaux	Billes de verre	Graviers moyens	25 % graviers gros et 75 % graviers moyens	Graviers gros
Dispersivité (cm)	0.248	0.915	1.214	2.056
Diamètre moyen des grains (cm)	0.20	0.50	0.60	0.90

Illustration 50 : Tableau de valeurs, relation entre dispersivité et diamètre moyen des grains

Le graphique ci-dessous (Illustration 51) montre la corrélation entre la taille des grains et dispersivité. Effectivement, la dispersivité augmente avec la taille des grains, le diamètre des pores est plus important pour un milieu constitué de grains de grosse taille.

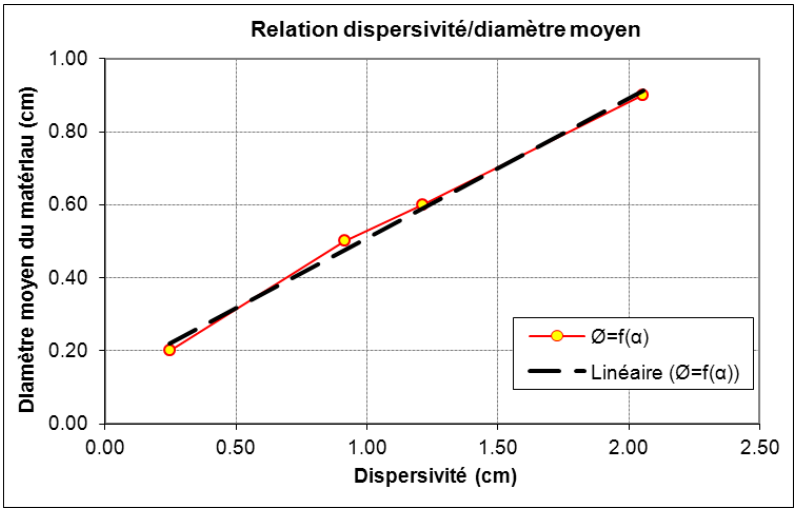


Illustration 51 : Graphique montrant la relation entre la dispersivité et le diamètre moyen des grains

- **Concentration du traceur**

La concentration a été estimée en supposant une restitution totale du traceur. D'après les résultats de traçages et en écartant les expériences dont les résultats sont aberrants, la concentration de la solution de traceur est en moyenne de 380 mg/L.

Ce résultat est précis aux erreurs d'expérimentation prêtes, la masse de traceur dans la seringue est estimée à partir d'une balance. La méthode de calcul de l'aire sous la courbe (méthode des trapèzes) est d'autant plus précise que le pas dt est fin. Le pas utilisé est le même que celui utilisé dans chaque expérience.

3.1.2. Suivi d'une pollution anthropique en écoulement naturel

Dans cet exemple, il est proposé d'interpréter le passage d'un polluant au droit d'un captage AEP en utilisant une solution analytique 2D couplée à une injection par paliers de concentration.

Contexte

Des analyses d'eau au droit d'un captage AEP ont montré le passage pendant plusieurs années d'une importante pollution au chloronitrobenzène (CNB). Ces concentrations importantes ont entrainé l'arrêt de l'exploitation du captage et engendrés des coûts importants pour la recherche de nouvelles ressources en eau.

Après étude, il s'avère qu'une usine située en amont du champ captant commercialise des peintures et colorants dont la base de fabrication repose sur l'utilisation de CNB. Deux accidents importants se sont produits au droit de l'usine, cependant les proportions exactes des différents CNB utilisés pour l'élaboration des colorants sont inconnues.

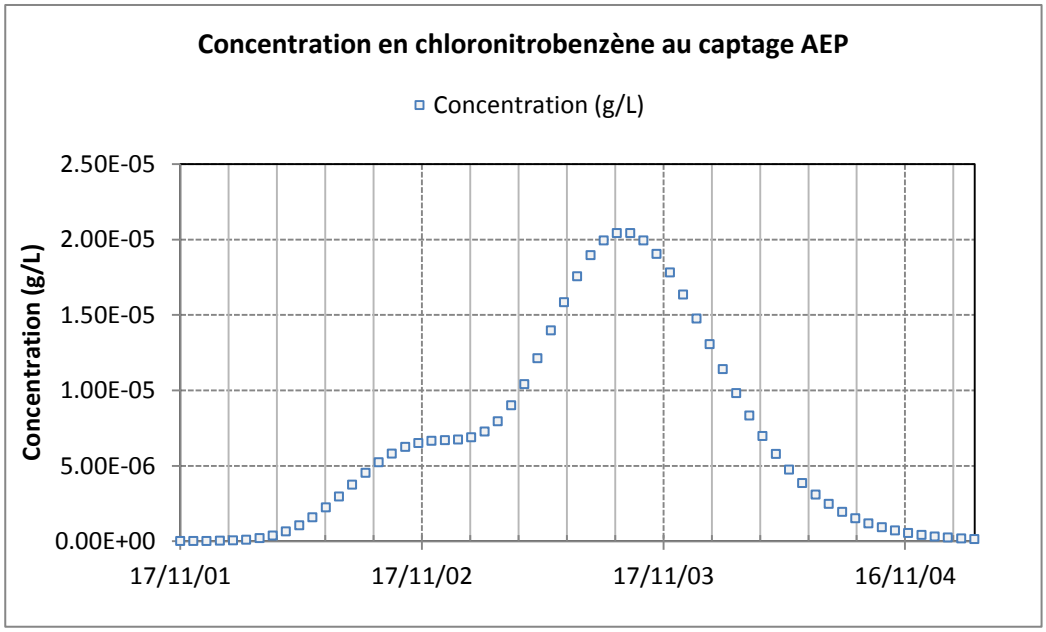


Illustration 52 : Concentration en CNB au droit du captage AEP

Présentation du secteur

Le champ captant a été l'objet d'une pollution accidentelle par un polluant organique de la famille des chloronitrobenzènes, constituée du dérivé ortho-chloronitrobenzène (abrégé o-cnb). La part de responsabilité de l'usine A vis-à-vis de la pollution a été évaluée en modélisant le transport des solutés. Le milieu étudié étant considéré

homogène, nous utiliserons une solution analytique adaptée pour simuler le transport des polluants en milieu poreux.

Le champ captant est situé en aval hydraulique de l'usine. L'usine A est à 3 km au sud et 50 m à l'est du champ captant (Illustration 53).

La pollution au niveau de l'usine A s'est produite entre le 21 janvier et le 10 février 2001 (soit 10 jours) et du 7 au 12 décembre 2001 (soit 5 jours).

Il a été supposé que les pollutions se sont produites sur une surface restreinte. A partir des tests d'infiltrométrie effectués sur le site, on considère qu'un mètre cube par jour pouvait s'infiltrer.

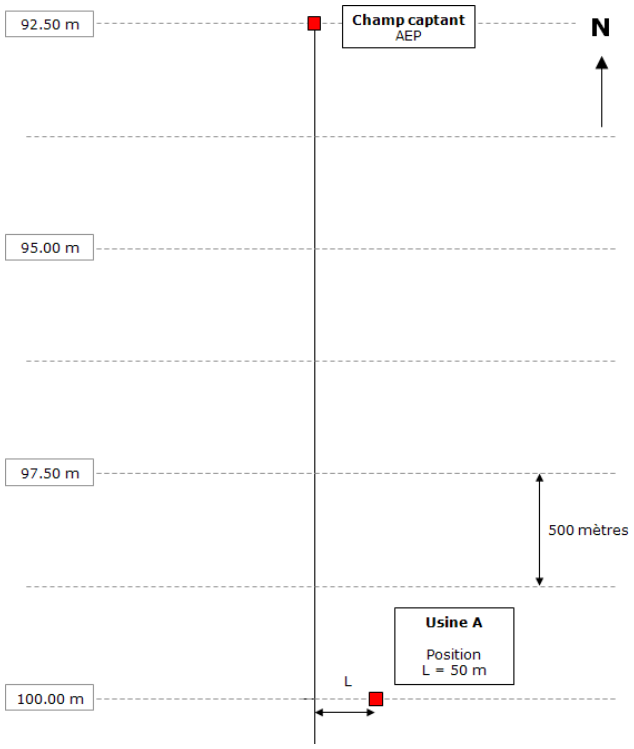


Illustration 53 : Schéma de la zone étudiée

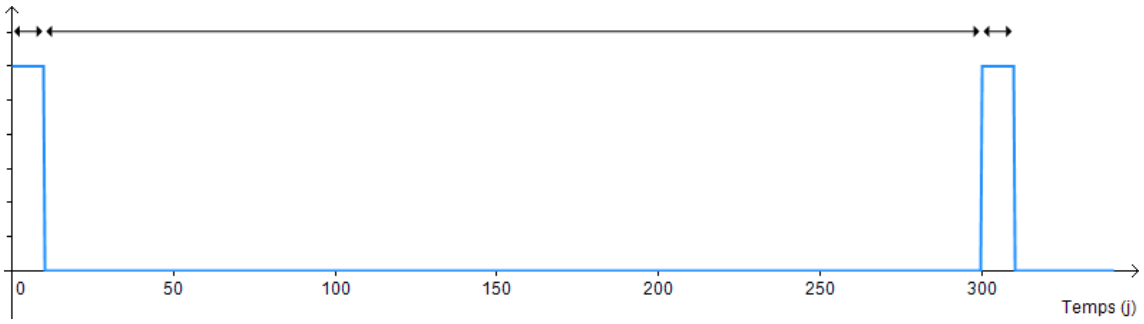


Illustration 54 : Période de pollution

Contexte hydrogéologique

L'aquifère est une nappe libre alluviale d'une épaisseur constante de 50 m. L'écoulement général de la nappe se fait du sud vers le nord avec un gradient hydraulique constant de 2.5 ‰. Les alluvions constituant l'aquifère sont considérés homogènes, la conductivité hydraulique estimée à partir de pompages d'essais est de $1x10^{-3}$ m/s.

Des essais de traçage ont permis de déterminer la porosité cinématique du massif alluvionnaire : $w = 5x10^{-2}$.

Résolution analytique

Le transport du soluté (o-cnb) au sein de l'aquifère, depuis l'usine (point source) jusqu'au champ captant (point d'observation), a été simulé à l'aide d'une solution analytique reproduisant les processus d'advection et de dispersion.

Le choix de la solution analytique à utiliser dépend de la configuration du système et des hypothèses simplificatrices posées. Les hypothèses établies pour étudier le système sont les suivantes :

- le milieu est homogène, isotrope et l'écoulement est uniforme ;
- le gradient hydraulique est constant ;
- il n'y a pas de sorption, le transport est conservatif ;
- on considère qu'il y a diffusion moléculaire en amont du point d'injection, le milieu est infini ;
- l'écoulement est en 2 dimensions, on suppose que le polluant est bien mélangé et que les gradients de concentrations verticaux sont négligeables ;
- les durées d'injection du polluant ne sont pas négligeables devant le temps de transport (~ 1000 jours), l'injection est continue (par palier de concentration).

La solution analytique sélectionnée est la suivante : « 2D / Continue / Infini / Constante / Débit [11] (Auteur : Fried, 1975 – Sauty, 1977, modifiée)

$$C(x,y,t) = \frac{qC_0}{4\pi e\omega u\sqrt{\alpha_L \alpha_T}} \int_0^t \frac{1}{t} \exp\left(-\frac{(x-ut)^2}{4\alpha_L ut} - \frac{y^2}{4\alpha_T ut} \right) \exp(-\lambda t) dt$$

Les paramètres de la solution analytique sont les suivants :

- C(x,y,t) : concentration du soluté au point d'observation (g/L) ;
- C_0 : concentration initiale du soluté au point source (g/L) ;
- q : débit d'injection du soluté au point source (m^3/s) ;
- e : épaisseur de l'aquifère (m) ;
- w : porosité cinématique (-) ;
- u : vitesse de déplacement des particules selon l'axe longitudinal (m/s) ;
- α_L : dispersivité longitudinale (m) ;
- α_T : dispersivité transversale (m) ;
- x : coordonnées du point source (m) ;
- y : coordonnées du point source (m).

L'utilisation de cette solution est prévue pour une injection continue. Or, le temps de transit moyen (1000 jours) n'est pas négligeable devant le temps d'injection du polluant. TRAC permet de simuler une injection par paliers de concentration par mise en application du principe de superposition afin de reproduire une « injection en créneau ».

La simulation du transport du polluant est analogue à la procédure d'interprétation d'un traçage vu précédemment :

- Démarrer TRAC (raccourci présent sur le bureau ou bien dans le menu « Démarrer », « Programme », « TRAC ») ;

- Cliquer sur le bouton « Interpréter un traçage » ;

- Dans l'onglet « Dossier », saisissez les informations contextuelles et techniques, puis sauvegardez votre « dossier Trac » (fichier *.trac). Pensez à sauvegarder régulièrement votre travail (Ctrl+s) ;

- Dans l'onglet « Données », importez les données de temps et concentration (fichier dans Mes Documents \Trac\Dossiers\Tutoriels\Polluant 2D\tutorial-2-o-cnb-v1.txt ;

- Dans l'onglet « Formule », filtrez les solutions par dimensions d'écoulement 2D, injection continue et dispersivité constante : sélectionnez la solution intitulée [11] ;

- Dans l'onglet « Paramètres » définissez les paramètres connus et les paramètres de calage.

En première approche, les paramètres suivants sont connus :

- $u = k * i / e = 1x10^{-3} * 2.5x10^{-3} / 5x10^{-2} = 5x10^{-5}$ m/s ;

- e = 50 m ;
- x = 3000 m, y = -50 m ;
- q = 86400^{-1} = $1.157x10^{-5}$ m^3/s;

Les paramètres suivants sont des paramètres de calages :

- les concentrations d'injection respectives du polluant (o-cnb) au droit de l'usine (A) $[o\text{-}cnb]_A$, (en g/L) ;
- les paramètres hydrodispersifs :
    - $D_L = u * \alpha_L$ (en m^2/s) ;
    - $D_T = u * \alpha_T$ (en m^2/s).

La dispersivité transversale peut être estimée à partir d'une relation empirique : $\alpha_L /100 < \alpha_T < \alpha_L /10$;

Le jour 0 (21/01/2001) est pris comme référence des temps. L'injection en créneau est réalisée en activant la case « Injection par paliers » qui affiche la fenêtre de configuration des paliers. Dans le premier onglet « Unités » définir les unités de temps et de concentration utilisées pour dans la définition des injections, ces unités peuvent être différentes de celles du graphique pour des raisons pratiques. Dans le deuxième onglet « Définition des paliers », spécifier les créneaux dont les durée d'injection sont connues mais les concentrations à déterminer par essai/erreur :

- La première injection à lieu du 21/01/2001 au 10/02/2001, soit de 0 à 10 jours. Pour reproduire cette injection saisir à la ligne n°1, la valeur 10 dans la colonne A (soit de 0 A 10 j) et une concentration a priori (exemple : 0.1 g/L) ;
- La deuxième injection à lieu du 07/12/2001 au 12/12/2001 soit du jour 300 au jour 305. Saisir à la deuxième ligne dans la colonne A t=300 j et C=0 g/L pour indiquer qu'il n'y a pas d'injection entre 10 et 300 jours. A la troisième ligne, saisir t=305 j et une concentration à priori. D'après la courbe de restitution, la concentration de la deuxième injection est supérieure à la première. Le schéma d'injection en créneau se dessine sous le tableau de valeur au fur et à mesure.
- Valider les paliers par OK et comparer les observations avec la simulation. Ajuster par essai/erreur la concentration des deux injections puis les paramètres hydrodispersifs.

Pour comparer différents jeux de paramètres, dans la fenêtre graphique cliquer sur l'icône « Ajouter une courbe » (Illustration 55). Les concentrations des injections en créneau sont identiques pour toutes les courbes.

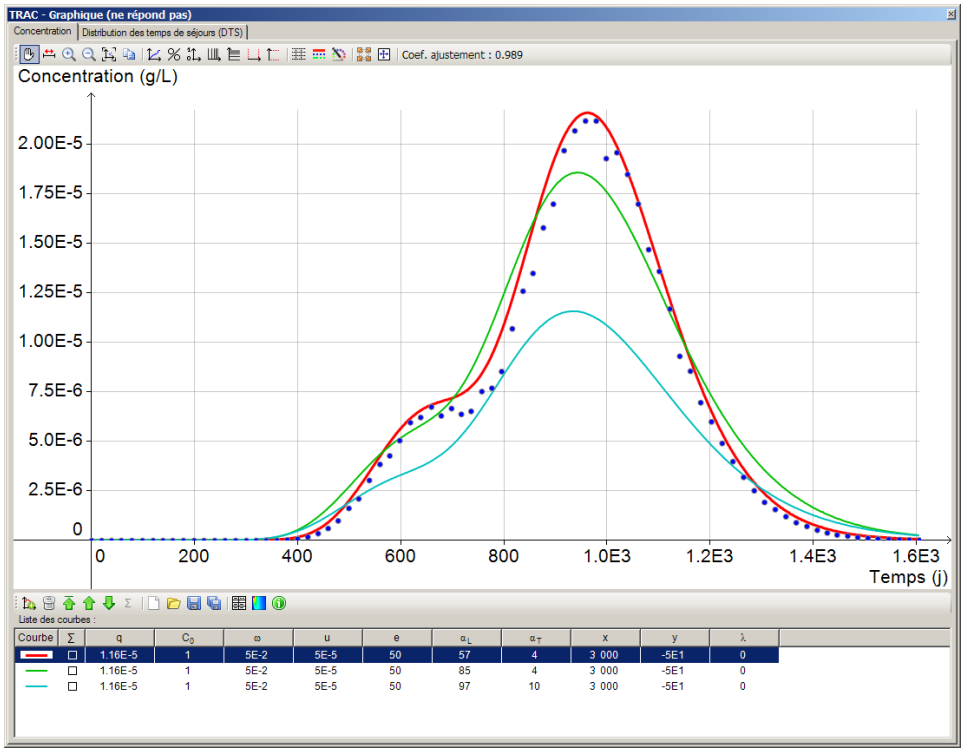


Illustration 55 : Comparaison entre observation et différents jeux de calage

La dispersivité peut être estimée en première approximation par une formulation empirique (Schulze-Makuch ; 2005, Longitudinal Dispersivity Data and Implications for Scaling Behavior, Ground Water 43, no. 3, p. 450).

$\alpha_L = c.L^m$ avec α_L : dispersivité longitudinale (L) ;

c : paramètre caractéristique du milieu géologique ($L^{(1-m)}$) ;

L : distance d'écoulement (L) ;

m : paramètre d'échelle.

Soit $\alpha_x = 0.80 * 3000^{0.40} = 20\,m$ et

$\alpha_y = 0.1 * \alpha_x = 0.1 * 20 = 2\,m$

La première phase de calage s'effectue par essai/erreur en faisant varier successivement le paramètre de dispersivité longitudinal et la concentration des deux injections au droit de l'usine (soient 3 paramètres). La relation entre α_L et α_T permet d'initialiser la simulation avec une valeur de départ mais n'est pas nécessairement conservée.

La qualité du calage est d'abord appréciée en visuellement en constatant l'écart entre les courbes de concentrations observées et les courbes de concentrations simulées en fonction du temps puis par l'intermédiaire du coefficient d'ajustement.

Résultats du calage

Le meilleur ajustement réalisé (terme d'erreur minimal) est obtenu avec le jeu de paramètres suivants :

- α_L = 47 m α_T = 5 m $[o\text{-}cnb]_A$ = 1 g/L $[o\text{-}cnb]_B$ = 6 g/L

On peut aisément déterminer la masse totale de CNB qui a été injectée dans le milieu, de manière analogue à l'essai de traçage en colonne. L'Illustration 56 présente l'estimation de la masse injectée (A et B distinguent la première de la deuxième injection) à partir des données de calage. La masse totale ayant rejoint la nappe est d'environ 15 kg.

Qinj. =	1.16E-05	m3/s
$[o\text{-}cnb]_A$ =	1	kg/m3 (g/L)
$[o\text{-}cnb]_B$ =	6	kg/m3 (g/L)
Qm_A =	1.16E-05	kg/s
Qm_B =	6.94E-05	kg/s
$t_{inj.}$ A =	10	j
$t_{inj.}$ B =	5	j
M_A =	10	kg
M_B =	30	kg

Illustration 56 : Masse injectée

Interprétation

Les simulations réalisées donnent des résultats satisfaisants en comparaison avec les données observées au droit du champ captant. La pollution arrivant en premier sur le captage AEP correspond à l'accident s'étant produit le 21/01/2001 où la concentration en CNB est moindre. Le premier pic de concentration simulé arrive aux alentours de 690 j, ce qui peut être vérifié en calculant le temps moyen d'arrivée du produit d'après les caractéristiques de la nappe :

$$t_{moyen} = \frac{L}{V_{moyenne}} = \frac{3000}{5.10^{-5} * 86400} = 694\ jours$$

Sur la base de ces paramètres, il est possible et intéressant d'analyser la sensibilité des paramètres hydrodispersifs afin de simuler leur impact sur la migration du polluant.

Les résultats obtenus reposent sur un certain nombre de simplifications hydrogéologiques, à l’aide d’une solution analytique et de la possibilité de réaliser une injection par palier de concentration, il a été possible de simuler le transport du soluté, de son point source jusqu’au point d’observation (captage AEP) et d’estimer la masse totale ayant atteint la nappe.

3.1.3. Essais de traçages sur le terrain en écoulement radial convergent

Les traçages en écoulement forcé permettent à la fois de maximiser la récupération du traceur, en raison de la convergence d'une partie des écoulements et donc du traceur vers le point de pompage et en même temps d'accélérer la procédure expérimentale (vitesses d'écoulement plus élevées qu'en régime naturel).

A ce jour, il n'existe pas de solution analytique exacte de cette configuration d'écoulement radial convergent. Cependant, une solution approchée a été développée par Sauty, puis par Thiéry (solution semi-analytique), pouvant être utilisée indépendamment du nombre de Péclet. A noter que l'effet de la dispersion transversale n'est pas négligé dans le schéma radial convergent. On peut démontrer que l'effet de la dispersion transversale, après intégration sur le cercle radial s'annule. Le champ de concentration à une date donnée dépend de la dispersion transversale, mais la concentration au puits ne dépend pas de cette dispersion transversale.

Neuf exemples (cas réels) de traçages en radial convergent sont fournis à titre d'exemple (Ginger Environnement). Le traçage est réalisé de la manière suivante. Le puits de pompage induit un écoulement radial convergent où la concentration en traceur est mesurée. Le traceur est injecté dans un piézomètre satellite, sous influence du cône de dépression.

Les paramètres relevés au cours de l'expérience, nécessaire à l'interprétation de l'essai sont les suivants :

- distance piézomètre satellite (injection du traceur) au puits de pompage (récupération du traceur) ;
- la masse de traceur injectée ;
- le débit de pompage ;
- l'épaisseur de l'aquifère, on suppose que le traceur est injecté de manière homogène sur toute la hauteur de l'aquifère.

Les paramètres de calages sont la porosité cinématique et la dispersivité longitudinale.

Il est proposé d'interpréter les essais suivants :

N° de l'essai	Lieu	Traceur	Débit de pompage (m3/h)	Epaisseur aquifère (m)	Distance injection-prélèvement (m)
1	Site 3	Fluoresceine	39.5	6.3	13.9
2	Site 2	Sulforhodamine B	38.5	10.0	15.0
3	Site 3	Sulforhodamine B	22.0	8.5	12.0
4	Site 1	Fluoresceine	22.0	8.5	20.0
5	Astaillac	Fluoresceine	24.1	10.4	21.5
6	Astaillac	Sulforhodamine B	24.1	10.4	19.5
7	Tauriac	Fluoresceine	45.0	8.0	14.4
8	Bretenoux	Fluoresceine	25.0	11.0	14.0

9	Bretenoux	Rhodamine	25.0	11.0	7.9

Résolution analytique

Il est proposé d'interpréter le premier essai, à l'aide d'une solution semi-analytique en écoulement radial convergent. Cette solution est décrite dans le manuel de validation. L'interprétation est conduite de manière analogue aux autres essais :

- Démarrer TRAC (raccourci présent sur le bureau ou bien dans le menu « Démarrer », « Programme », « TRAC ») ;

- Cliquer sur le bouton « Interpréter un traçage » ;

- Dans l'onglet « Dossier », saisissez les informations contextuelles et techniques, puis sauvegardez votre « dossier Trac » (fichier *.trac). Pensez à sauvegarder régulièrement votre travail (Ctrl+s) ;

- Dans l'onglet « Données », importez les données de temps et concentration, pour notre exemple le fichier 01-pompage-fluoresceine-site-3.csv (dans Mes Documents\Trac\Dossiers\Tutoriels\Pompage Radial), les unités des temps, concentration et débit sont automatiquement reconnues ;

- Dans l'onglet « Formule », filtrez les solutions par dimensions d'écoulement radial convergent, injection brève, sélectionnez la solution intitulée : Radial convergent / Brève / Constante / Masse [18] ;

- Dans l'onglet « Paramètres » définissez les paramètres connus et les paramètres de calage.

En première approche, les paramètres suivants sont connus :

- la vitesse réelle moyenne u est calculée automatiquement ;
- e = 6.3 m ;
- r = 13.9 m ;
- q = 39.5 m^3/h ;

Si la masse injectée n'est pas connue, il est possible de calculer à minima la masse restituée d'après la courbe de restitution. En première approximation, on prendra comme valeur pour les paramètres suivants :

- Masse injectée : indiquer la masse restituée calculée par TRAC, soit 0.65 g. Il est prévu dans une prochaine version de TRAC, de saisir la masse réellement injectée et d'ajouter un facteur de restitution divisant par autant la masse injectée ;
- Porosité cinématique : 5 % ;
- Dispersivité longitudinale : 1 m ;

Dans un premier temps, dans la fenêtre graphique, le pourcentage de masse restituée indique une valeur d'environ 93 %, calculée sur la base des observations. On ajuste la masse injectée de telle sorte à ce que la restitution soit de 100 % (hypothèse de la restitution totale du traceur). On augmente ensuite la porosité de façon à diminuer la vitesse d'écoulement et augmenter le temps moyen d'arrivé du traceur. Diminuer la dispersivité longitudinale permet de caler correctement la courbe d'observation et la courbe simulée.

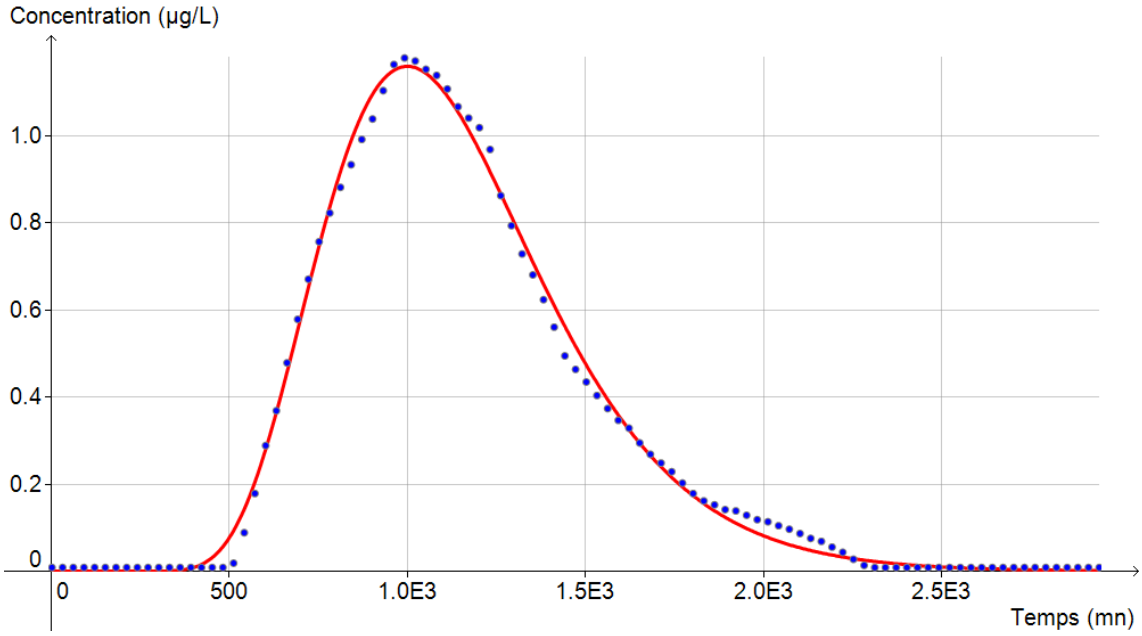


Illustration 57 : Calage d'un essai de traçage en écoulement radial convergent

L'interprétation de cet essai donne une porosité cinématique de l'ordre de 18 % et une dispersivité longitudinale de l'ordre de 0.5 m. Les autres essais peuvent être interprétés de la même manière. Certains essais ont été réalisés dans le même aquifère et les paramètres d'un essai peuvent être comparés au second.

3.2. SIMULATION ET DIMENSIONNEMENT D'UN TRAÇAGE

Le mode simulation (approche directe) permet de dimensionner un traçage. L'exemple suivant présente le dimensionnement d'un traçage en écoulement radial convergent, avec injection instantanée.

3.2.1. Traçage en écoulement forcé : radial convergent

Afin de dimensionner ou d'obtenir une première approximation des conditions de traçages (durée, quantité de traceur à injecter, concentration attendue, échantillonnage) il est possible de simuler la migration d'un traceur. Il est proposé de simuler un traçage en écoulement radial dont les caractéristiques sont les suivantes :

- Débit de pompage : 40 m^3/h ;
- Epaisseur aquifère : 10 m ;
- Distance piézomètre d'injection - puits de pompage : 20 m ;

La porosité n'est pas connue, mais à priori entre 1 % et 10 % d'après le matériau géologique aquifère, la dispersivité est prise entre 1/10 et 1/5 de la distance rectiligne parcourue entre le point d'injection et le point de restitution (2 à 4 m). La masse à injecter dépend de la concentration attendue au point de restitution, dépendant elle-même des paramètres hydrodispersifs que nous souhaitons déterminer. Il s'agit d'un problème inverse, connaissant les effets, nous souhaitons en déterminer les causes (paramètres). Il est proposé d'injecter une masse initiale (0.1 kg) d'après ce premier jeu de paramètre, puis de l'ajuster.

Procédure

- Démarrer TRAC (raccourci présent sur le bureau ou bien dans le menu « Démarrer », « Programme », « TRAC ») ;

- Cliquer sur le bouton « Simuler et dimensionner un traçage » ;

- Dans l'onglet « Dossier », saisissez les informations contextuelles et techniques, puis sauvegardez votre « dossier Trac » (fichier *.trac). Pensez à sauvegarder régulièrement votre travail (Ctrl+s) ;

- Dans l'onglet « Formule », filtrez les solutions par dimensions d'écoulement radial convergent et injection brève : sélectionnez la solution intitulée [18] ;

- Dans l'onglet « Paramètres » définissez d'abord les unités de temps et concentration compatibles avec votre expérience, par exemple jours et µg/L, puis saisir les paramètres de la solution analytique.

- Il est proposé d'analyser l'impact des paramètres (porosité cinématique, dispersivité longitudinale) sur la concentration au point de restitution afin d'ajuster au mieux la durée d'observation / prélèvement du traceur au puits. Dans la fenêtre graphique, cliquer sur l'icône « Ajouter une courbe » (raccourci touche Insert.) afin d'ajouter autant de courbe que nécessaire tout en modifiant les paramètres ad'hoc pour chacune :

    - Courbe 1 : w=0.1, alpha_L=2 ;

    - Courbe 2 : w=0.01, alpha_L=2 ;

    - Courbe 3 : w=0.1, alpha_L=4 ;

    - Courbe 4 : w=0.01, alpha_L=4).

L'Illustration 58 présente le résultat des simulations. On remarque que la dispersivité (variant de 1/10 à 1/5 de « r ») a un impact limité sur le temps du pic de concentration.

En revanche, la porosité de 1 % à 10 % est un paramètre plus sensible et impact plus fortement le temps du pic et sa concentration, respectivement de 3 heures (600 µg/L) et 1 jours (70 µg/L).

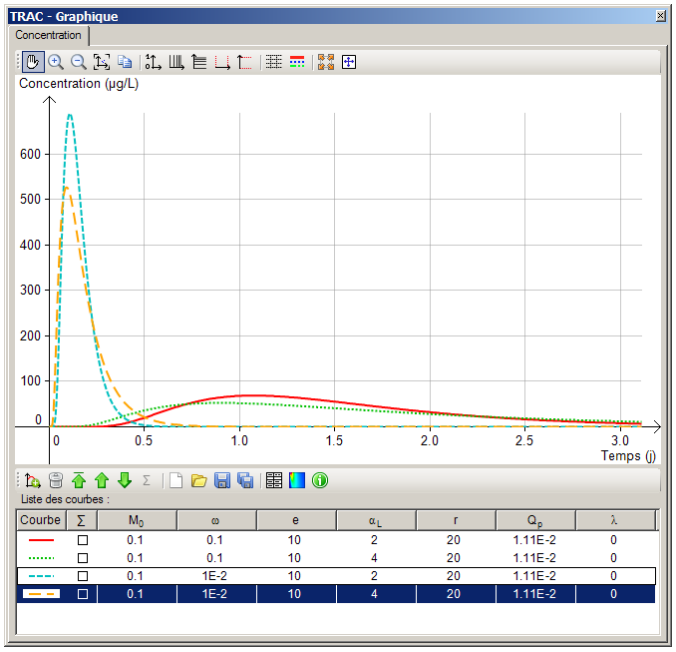


Illustration 58 : Simulations d'un traçage

L'utilisateur peut aisément créer autant de courbe que nécessaire pour analyser l'impact d'un paramètre et simuler le temps d'arrivé du traceur comme présenté ci-dessous (Illustration 59) où chaque simulation montre une variation de porosité du milieu de 1 %.

L'icône de la fenêtre graphique « Analyse de sensibilité » permet de générer un champ de valeurs de concentration en fonction du temps et d'un paramètre au choix de l'utilisateur afin de réaliser une analyse de sensibilité sur la simulation. L'Illustration 60 montre la variation de la concentration (couleur, sans légende, la concentration est affichée au passage de la souris) en fonction du temps en abscisse et du paramètre sélectionné par l'utilisateur (ici, la dispersivité longitudinale) en ordonnée.

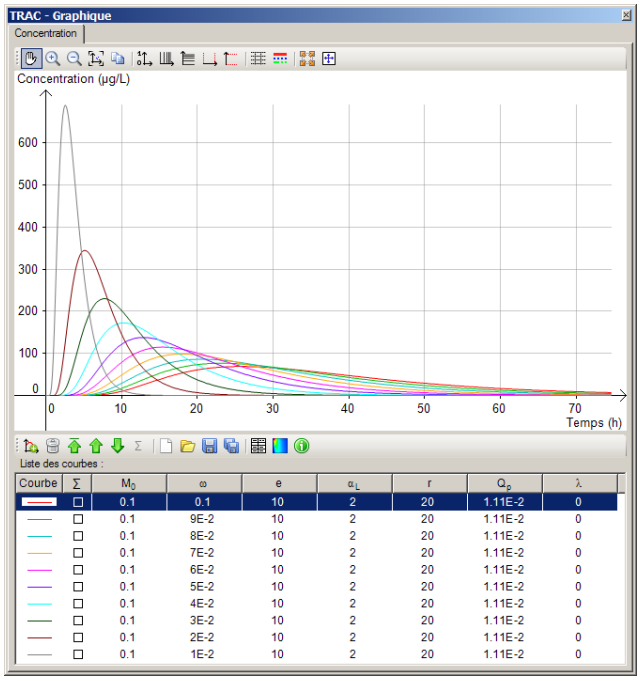


Illustration 59 : Jeux de courbes simulées

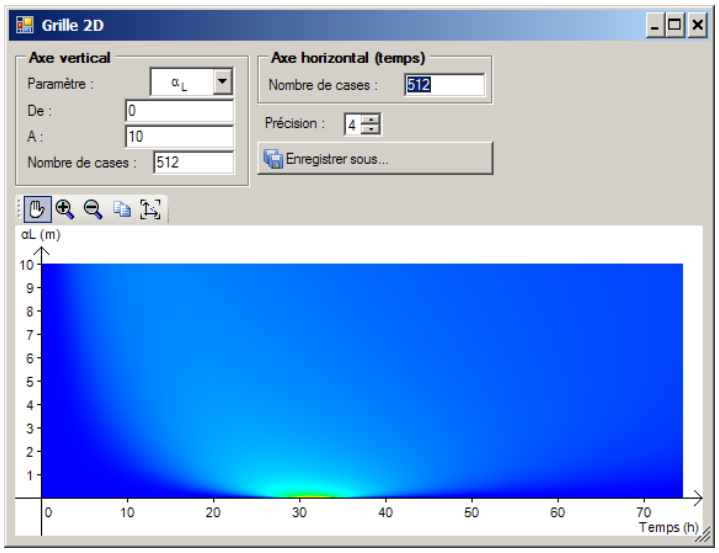


Illustration 60 : Analyse de sensibilité

L'onglet « Dimensionnement » permet d'une part de définir la masse à injecter de telle sorte que la concentration souhaitée soit obtenue et d'autre part de définir la fréquence d'échantillonnage.

On souhaite, à minima, obtenir une concentration de 500 µg/L, saisir cette valeur dans le champ prévu à cet effet (Concentration attendue) ainsi que l'unité et cliquer sur le bouton « Déterminer » afin de calculer la masse nécessaire. La masse (72.53 g, pour

la simulation w=0.01 et alpha_L=2) est automatiquement affectée à la simulation actuelle, et la courbe de restitution recalculée.

Pour l'échantillonnage au puits, il est possible d'utiliser l'encart « Mesures à effectuer » prévu à cet effet. Ce dernier permet d'espacer les mesures en fonction du temps (à pas de temps constant), en fonction de la concentration (différence de concentration) ou de croiser les deux. Cliquer sur le bouton « Déterminer » afin de calculer un échantillonnage par défaut (30 valeurs, à pas de temps constant) qui doit être adapté. Cliquer ensuite sur « Afficher le tableau des valeurs » pour exporter les temps à échantillonner.

4. Conclusion

Le manuel de TRAC permet d'accompagner l'utilisateur dans les diverses utilisations couvertes par le logiciel. Le manuel traite d'une part la simulation et le dimensionnement de traçages à des fins prédictives et d'autre part l'interprétation des essais de traçages permettant la caractérisation des propriétés hydrodispersives du milieu.

Il propose en plus de la description de l'interface, des fonctionnalités des différentes fenêtres, un tutoriel afin de prendre en main l'outil sur des exemples pratiques. L'aspect collaboratif de TRAC est également traité, ainsi, l'utilisateur peut contribuer à l'évolution de l'outil en proposant soit :

- de nouvelles solutions analytiques, qui peuvent être ajoutées à TRAC ;
- une participation sur la traduction de TRAC (anglais, espagnol) ou bien même une nouvelle langue (allemand, italien, …) ;
- des unités selon le contexte ou le pays dans lequel l'outil est utilisé.

Ces mises à jour pourront profiter à la communauté des utilisateurs via le site web de TRAC. Les fichiers *.trac permettent d'intégrer données de terrain et interprétation et ainsi de partager facilement des essais de traçages entre collaborateurs.

5. Bibliographie

Field M.; (2002); The QTRACER2 program for tracer-breakthrough curve analysis for tracer tests in karstic aquifers and other hydrologic systems; EPA/600/R-02/001

Käss W.; (1998); Tracing Technique in Geohydrology; A. A. Balkema, Rotterdam, Brookfield, Vt., 581 p.

Klinka T., Gutierrez A. ; (2012) ; Validation du logiciel TRAC : Aide à l'interprétation de traçages en milieu poreux ;Rapport BRGM RP-59425-FR

Rosenbrock H.H.; (1960); An automatic method for finding the greatest or the least value of a function; Computer journal 3.3., p. 175-184, Oct. 1960.

Sauty J.P, Kinzelbach W., Voss A.; (1992); Computer Aided Tracer Test Interpretation (CATTI), program documentation, International Ground Water Modeling Center, Golden, Colorado, 64 p.

Simunek, J., M. Th. van Genuchten, M. Sejna, N. Toride, and F. J. Leij, The STANMOD computer software for evaluating solute transport in porous media using analytical solutions of convection-dispersion equation. Versions 1.0 and 2.0, IGWMC - TPS - 71, International Ground Water Modeling Center, Colorado School of Mines, Golden, Colorado, 32pp., 1999

Toride N.,Leij F.J., Van Genuchten M.Th.; (1995); The CXTFIT code for estimating transport parameters from laboratory or field tracer experiments; Version 2.0, Research Report n°137, US Salinity Laboratory (1995)

Wexler E.J.; (1991); Analytical solutions for one-, two-, and three-dimensional solute transport in ground-water systems with uniform flow, Techniques of. Water-Resources Investigations of the USGS, Chapter B7

Annexe 1

Caractéristiques des colonnes de traçages

	Billes de Verre	Graviers moyens	Graviers gros	Mélange 25% gros + 75% moyens	
Diamètre de la colonne	5.8	6.0	5.8	5.0	cm
Longueur de la colonne	85.3	84.5	85.0	64.5	cm
Poids matériau	3741.85	3161.00	3325.30	1822.99	g
Densité	2.717	2.662	2.730	2.713	-
Calcul de la porosité	0.39	0.50	0.46	0.47	%
Distance de traçage	78.7	78.3	78.7	63.4	cm

Annexe 2

Programmation de nouvelles formules dans TRAC

Une des motivations dans le développement de TRAC a consisté à permettre aux utilisateurs de pouvoir saisir et implémenter leur propre solution analytique ou d'autres solutions non implémentées actuellement dans le logiciel. Il est également possible de fournir un schéma de traçage (une image) associé à cette solution.

Le fichier « Formules.ini » contient toutes les formules de TRAC, il est conseillé de ne pas le modifier mais d'utiliser le fichier « MesFormules.ini », dédié à l'ajout des solutions analytiques par les utilisateurs et situé dans le répertoire Mes documents\TRAC.

Pour implémenter une nouvelle solution analytique, fermer d'abord le programme et ouvrir le fichier Formules.ini et MesFormules.ini (qui se trouvent dans le répertoire programme de TRAC) avec un éditeur de texte (Notepad++ par exemple). Une fois les modifications effectuées, au lancement du programme, la formule est ajoutée à la liste des solutions analytiques.

Si la formule doit être classée selon un attribut (type d'injection, type d'écoulement, dispersivité constante) qui n'est pas encore défini il est nécessaire de l'ajouter dans la section [Attributs] du fichier MesFormules.ini et ajouter éventuellement une traduction comme c'est le cas pour l'attribut « type d'écoulement », « radial convergent » :

```
[Attributs]
Dimensions=1D, 2D, 3D, Radial convergent
Dimensions.Radial convergent.English=Radial converging
Dimensions.Radial convergent.Espagnol=Radial convergente
```

Il faut ensuite vérifier que tous les paramètres utilisés dans la formule nouvellement ajoutée sont déjà définis dans la section [Paramètres] du fichier Formules.ini. Un paramètre est une valeur d'entrée saisie par l'utilisateur, il est à distinguer des sous-expressions, qui sont des formules pour calculer des variables intermédiaires. Si une variable peut être calculée à partir d'autres variables déjà existantes, ce n'est pas un paramètre.

Pour ajouter un paramètre, il faut ajouter sa description et la traduction de ces descriptions en anglais et espagnol. Une traduction est définie par un champ Libellé.NomLangue où NomLangue est la langue de destination. La description contient à la fin l'unité entre parenthèses. Par exemple, si le nouveau paramètre est la dispersivité transversale verticale $D_z=\alpha^*u$:

```
D_Z=Dispersion transversale verticale (m2/s)
D_Z.English=Transversal vertical dispersion (m2/s)
D_Z.Espagnol=Dispersión transversal vertical (m2/s)
```

Il faut ensuite ajouter une section pour la nouvelle formule. Le nom de la section est un identifiant qui doit être unique, et qui ne contient pas les caractères suivants : \ / : * ? " < > | ainsi que les lettres accentuées, par exemple, pour notre solution 3D :
`[3D_breve_infini_constante_src_ponctuelle]`

Dans la section, les champs suivants sont nécessaires : NumeroSolution, Auteur, Libellé, Attributs, Formule, Distance, UnitéTemps, UnitéConcentration :

- le NumeroSolution correspond à un identifiant unique défini pour chaque solution, il est conseillé de commencer la numérotation de vos propres solutions à 100 afin de ne pas créer de doublons avec les solutions de TRAC :
  `NumeroSolution=100`
- Auteur renseigne le nom du ou des auteurs ainsi que la date de publication de la solution et éventuellement les références :
  `Auteur=Hunt, 1978`
- le Libellé est une description sous forme de texte qui apparaît comme nom de la solution dans TRAC :
  `Libellé=3D / Brève / Infini / Constante / Masse [14]`
  `Libellé.English=3D / Brief / Infinite / Constant / Mass [14]`
  `Libellé.Espagnol= 3D / Breve / Infinito / Constante / Masa [14]`
- les Attributs sont ceux définis dans la section [Attributs]. Si vous ne les définissez pas, la formule ne sera pas classée. Le classement est utile pour faciliter la recherche par filtre parmi la liste des solutions :
  `Attributs=3D, Injection Dirac, Dispersivité constante, Complexe`
- la Formule est une expression mathématique. Elle peut contenir des sous-expressions, c'est-à-dire des noms de variables qui sont évaluées à partir d'autres variables ou paramètres. Une sous-expression peut être définie comme un champ dans la section de la formule. Dans ce cas, elle est privée, c'est-à-dire accessible seulement pour cette formule. Sinon, certaines sous-expressions sont définies dans la section [Expressions] du fichier Formules.ini. Elles sont publiques, c'est-à-dire accessible par toutes les formules. Si vous en ajoutez une à cet endroit, prenez garde à ce qu'elle ne remplace pas un paramètre ou une sous-expression déjà existante.

$$C(x,y,z,t)=\frac{M}{8\,\omega\sqrt{\pi^3\,t^3 D_x D_y D_z}}\exp\left[-\frac{(x-ut)^2}{4D_x t}-\frac{y^2}{4D_y t}-\frac{z^2}{4D_z t}\right]$$ s'écrit :

```
Formule=M_0/(8*omega*sqrt(pow(Pi,3)*pow(t,3)*D_L*D_T*D_Z))*exp(-
pow((x-u*t),2)/(4*D_L*t)-(pow(y,2)/(4*D_T*t))-
(pow(z,2)/(4*D_Z*t)))
```

Les formules intègrent les opérateurs suivants (respectez la casse) :
Addition, soustraction, multiplication, division : + - * /
Fonction puissance : x^n → pow(x,n)
Fonction racine : $\sqrt{x}$ → sqrt(x)
Fonction exponentielle : e^x → exp(x)
Intégrale : $\int_a^b x$ → Intégrale(x,a,b) ou bien Intégrale(x,a,b,position max).

L'expression est une fonction de t, a et b définissent les bornes d'intégration inférieure et supérieure. Enfin, position max définit la position pour laquelle l'expression prend sa valeur maximale, qui est utile si l'intégrale contient un appel à la fonction exponentielle « exp() ». S'il n'y a pas de fonction exponentielle, la position du maximum n'a pas besoin d'être précisée

- la Distance est la formule qui permet de calculer la distance entre le point d'injection et le point de mesure :
  `Distance=sqrt(pow(x,2)+ pow(y,2)+ pow(z,2))`
- Enfin, il faut préciser les unités utilisées par défaut : UnitéTemps définit l'unité du paramètre temps, et UnitéConcentration définit l'unité dans laquelle est exprimée la formule :
  `UnitéTemps=s`
  `UnitéConcentration=kg/m3`

Au final, voici notre exemple complet, introduit dans le fichier MesFormules.ini :

```
[3D_breve_infini_constante_src_ponctuelle]
NumeroSolution=100
Auteur=Hunt, 1978
Libellé=3D / Brève / Infini / Constante / Masse [14]
Libellé.English=3D / Brief / Infinite / Constant / Mass [14]
Libellé.Espagnol=?To translate
Attributs=3D, Injection Dirac, Dispersivité constante, Complexe
D_Z=alpha_Z*u
Formule=M_0/(8*omega*sqrt(pow(Pi,3)*pow(t,3)*D_L*D_T*D_Z))*exp(-
pow((x-u*t),2)/(4*D_L*t)-(pow(y,2)/(4*D_T*t))-(pow(z,2)/(4*D_Z*t)))
Distance=DeltaM/(8*n_f*sqrt(pow(Pi,3)*pow(t,3)*D_L*D_T*D_Z))
UnitéTemps=s
UnitéConcentration=kg/m3
```

Il est possible d'associer un schéma du système de traçage à la formule. Pour cela, il faut ajouter un fichier image au format PNG dans le répertoire Images avec pour nom de fichier l'identifiant de la formule, ci-dessus entre crochets (soit 3D_breve_infini_constante_src_ponctuelle.png dans notre exemple), les espaces étant remplacés par des soulignements "_".

Si le schéma contient du texte, par exemple en français, il est possible de créer une version dans une autre langue de l'image. Pour cela, il faut ajouter un fichier *.PNG dans les sous-répertoires de Images portant le nom de la langue. Par exemple copier le fichier image en conservant le même nom dans « Images\English » pour la version anglaise du schéma. Lorsque TRAC sera lancé en anglais, c'est ce fichier image qui sera utilisé (Images\English 3D_breve_infini_constante_src_ponctuelle.png au lieu du fichier Images\3D_breve_infini_constante_src_ponctuelle.png correspondant à la version française).

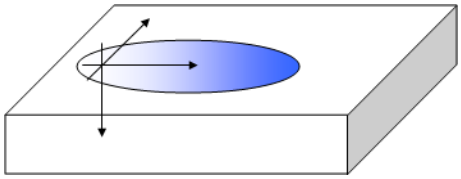


Illustration 61 : Exemple de schéma de traçage

Annexe 3 :

TRAC, a collaborative computer tool for tracer-test interpretation

Publication soumise et acceptée à The European Physical Journal (EPJ). Parution prévue début 2013.

TRAC, a collaborative computer tool for tracer-test interpretation

A. Gutierrez[1],T. Klinka[1], D. Thiéry[1], E. Buscarlet[1], S. Binet[2] , N. Jozja[3], C. Défarge[2,3], B. Leclerc[4], C. Fécamp[2], Y. Ahumada[5] , J. Elsass[6]

[1]BRGM, Service Eau. BP 36009, 45060 Orléans cedex 2, France.
[2]Université d'Orléans, Université François Rabelais – Tours, CNRS/INSU, Institut des Sciences de la Terre d'Orléans – UMR 6113, Polytech'Orléans, 45072 Orléans cedex 2, France
[3]Université d'Orléans, CETRAHE, (CEllule R&D d'Expertise et de TRAnsfert en TRAçages Appliqués à l'Hydrogéologie et à l'Environnement), 45072 Orléans cedex 2,
France
[4]EDREE Parc des Aulnaies - 84, rue du Beuvron- 45160 Olivet
[5]Institut EGID - Bordeaux 3 - 1, allée F. DAGUIN - 33607 PESSAC CEDEX - FRANCE
[6] Software development. circular@operamail.com

Corresponding author: a.gutierrez@brgm.fr

Abstract. Artificial tracer tests are widely used by consulting engineers for demonstrating water circulation, proving the existence of leakage, or estimating groundwater velocity. However, the interpretation of such tests is often very basic, with the result that decision makers and professionals commonly face unreliable results through hasty and empirical interpretation. There is thus an increasing need for a reliable interpretation tool, compatible with the latest operating systems and available in several languages. BRGM, the French Geological Survey, has developed a project together with hydrogeologists from various other organizations to build software assembling several analytical solutions in order to comply with various field contexts. This computer program, called TRAC, is very light and simple, allowing the user to add his own analytical solution if the formula is not yet included. It aims at collaborative improvement by sharing the tool and the solutions. TRAC can be used for interpreting data recovered from a tracer test as well as for simulating the transport of a tracer in the saturated zone (for the time being). Calibration of a site operation is based on considering the hydrodynamic and hydrodispersive features of groundwater flow as well as the amount, nature and injection mode of the artificial tracer. The software is available in French, English and Spanish, and the latest version can be downloaded from the web site http://trac.brgm.fr.

1 Introduction

Contaminant migration in aquifers threatens groundwater quality and the exploitability of water-supply wells. Tracer tests are often used for assessing the vulnerability of groundwater bodies, as well as the velocity of contaminant flow and its pathways. Tracer test interpretation also provides hydrodispersive parameters that are used as input for flow and transport models.

In France, tracer tests are widely used for defining protection zones around water-supply wells; their interpretation generally relies on abacus [1,2], or uses the simple CATTI [3] program running under MS-DOS.

The increasing demand for such expertise and the growing interest in health and environmental problems requires new and improved methods.

Since the end of the 19th Century, many experiments and studies have been carried out to understand and simulate transport, adsorption, desorption, degradation and reaction of solutes in variably saturated underground media. Analytical or numerical models were developed for determining the solute concentration *versus* time and distance from the original contamination point. However, the few dedicated tools for tracer-test interpretation are not evolving. Interpretation of a tracer test consists in deducing parameters from the evolution of concentration over time, at an observation point located at a certain distance from the injection point. These parameters, generally designed as hydrodispersive parameters, include transit time, kinematic porosity, dispersion, retardation factor, first-order degradation coefficient, etc., which are used for a simple characterization of the behaviour of a perfectly water-miscible solute in movement towards or within groundwater bodies. Tracer-test analysis requires drawing a concentration *versus* time graph, called the breakthrough curve. Its interpretation can follow two different ways:

- From an initial asumption of flow and transport parameters, the computation of a theoretical breakthrough curve aims at getting a good fit with the observed one. This is the direct problem;
- Hydrodispersive parameters are directly computed from the observed concentrations. This is the inverse problem.

The computation codes for interpreting a breakthrough curve discussed here use an analytical solution derived from the general convection-dispersion equation to evaluate solute transport in porous media. This equation can be written as follows: considering *C(x,t)* as the volumetric mass concentration of the contaminant and q_w the flux velocity vector, if no adsorption reactions occur between the contaminant and the surrounding porous medium, then the transport is determined by convection and diffusion. The mass conservation law implies that

$$f(x,t) = \phi \frac{\partial C(x,t)}{\partial t} + \nabla \cdot (D \nabla C(x,t)) - q_w \cdot \nabla C(x,t) \qquad (1)$$

where, f(x,t) is the external contamination-source rate of injection, ø is the kinematic porosity, and D stands for the diffusion tensor. The second and third terms of the equation correspond to Fick's first law, which assumes that the contaminant flux is proportional to the local concentration gradient. The second term is known as the diffusive flux and the third one the convective (or advective) flux.

Considering adsorption, the mass balance equation becomes

$$f(x,t) = \frac{\partial (\phi C(x,t) + \rho S(x,t))}{\partial t} + \nabla \cdot (D \nabla C(x,t)) - q_w \cdot \nabla C(x,t) \qquad (2)$$

where ρ corresponds to the bulk density of soil and *S* is the adsorbed mass concentration. *S* is linked to concentration through a linear adsorption isotherm of the form

$$S(x,t) = k_d C(x,t) \qquad (3)$$

where k_d is an empirical distribution coefficient.

Taking equation (3) into account, equation (2) can be written as:

$$f(x,t) = R\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} + \nabla \cdot (D\nabla C(x,t)) - q_w \cdot \nabla C(x,t) \quad (4)$$

where R is the retardation factor (dimensionless):

$$R = \phi + \rho k_d \quad (5)$$

Several tools derived from this general equation are compared hereafter. They usually share the following hypothesis:

- The porous medium is homogeneous,
- Flow is uniform or radial,
- Tracer injection may be instantaneous injection (Dirac) or continuous (constant concentration step). Some of the tools consider successive injection steps of various concentrations (multi-step) or exponential decay.

Tools that allow considering degradation or sorption/desorption phenomena of a tracer in a porous medium are less numerous. CATTI [3] proposes a solution to account for the scale dependency of longitudinal dispersivity typically encountered in applied field problems [4].

Table 1 summarizes the main characteristics of software used for tracer-test interpretation. Most run under DOS mode and are incompatible with the latest operating systems. The TRAC software, presented in this paper, has been added to the table below.

	Problem Resolution		***Dimension***			***Input signal***				***Physical phenomena***				
Code	**Direct**	**Inverse**	**1D**	**2D**	**Radial**	**Dirac**	**Constant**	**Multiple steps**	**Exp. decay**	**Degradation**	**Delay**	**Production**	**Dispersion with scale**	**Double porosity**
CATTI [3]	X	X	X	X	X	X	X		X	X	X(1)	X(2)	X	X
CXTFIT [5]	X	X	X			X	X	X	X	X	X	X		
TRACI95 [6]	X	X	X		X	X								X
QTRACER2 [7]		X												
EHTD [8]		X												
TRAC(3)	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X		X(2)	X	

(1) CATTI considers a constant delay with the Dirac injection type
(2) Production corresponds here to an initial concentration in the aquifer (initial noise)
(3) TRAC version 1.3.8 presented in this paper

Table 1: Comparison of several codes used in tracer test interpretation

2. Software description

TRAC is software developed with the objective of filling the lack of computer tools for interpreting tracer tests. Its aim is to remain both simple, in order to correspond to basic engineering needs, and advanced with an option that enables an evolved mode where solutions that are more complex are available. It operates based on analytical solutions that can be selected depending on the configuration of the tracer test. Up to now, the following scenarios are available:

- 1D, 2D, radial converging/diverging flow;
- Instantaneous (Dirac), continuous or step-injection;
- Possibility of taking into account a delay factor and a degradation constant (exponential form);
- Space (i.e. time) variable dispersivity in 1D to consider the scale effect;
- Variable direction of flow in order to respect the uncertainty of groundwater flow direction;
- Possibility to do a multi-step injection for all solutions with continuous injection (use of the superposition principle).

Tracer-testing methods continue to evolve and new interpretation methods are being developed. TRAC gives experienced users the possibility to introduce their own analytical solution. TRAC can thus be continuously updated and enhanced by contributions of the user community.

TRAC's start-up offers two modes: "simulate and design" or "interpret" field-tracer tests or soil-column experiments.

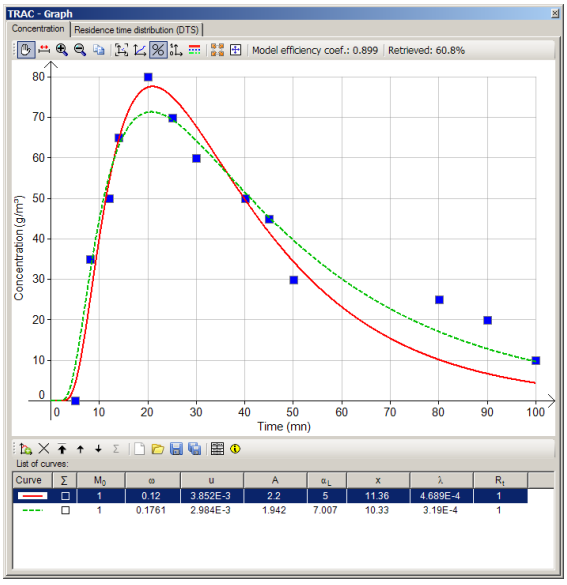


Fig. 1: Screenshot of the TRAC graphic window.

The "simulation" mode, used for preparing a tracer test, helps estimating the optimal mass or concentration to be injected and the sampling frequency at the restitution point.
The "interpretation" mode consists in determining the hydrodispersive parameters of the medium by calibration. This is done by selecting one of the available analytical solutions and, from a set of parameters fixed by the user and a range of possible values, the software search for an optimized best fit (Fig. 1). Every parameter can be set up for optimization or not. TRAC lets the user define whether he wants to optimize a specific parameter or not, and in which range he accepts this parameter to vary.

Once the interpretation is done, the printing options allow a synthetic representation of the tracer-test interpretation, including a summary of the parameters or a plot of the cumulative restitution curve.

3. Analytical solutions

The present list of analytical solutions (TRAC v1.4.4) amounts to 14 in the advanced mode, but only 12 have been validated up to now. The other ones are in the validation process, which consists in comparing the results of a set of parameters with several other tools against TRAC. Other tools can be Excel® or Fortran® programs of the analytical solution, and mathematical modelling using the MARTHE finite-volume code [17]. The list of symbols and notations used in the following formulas is given below (Table 2)

α_T	(m)	[L]	=	Transversal dispersivity	
C_0	(kg/m^3)	[M/L3]	=	Injection concentration of tracer.	
C	(kg/m^3)	[M/L3]	=	Concentration of tracer at point (x,y,z) and time (t).	
D_L	(m^2/s)	[L2/T]	=	Longitudinal dispersion ($DL=\alpha L*u$)	
D_T	(m^2/s)	[L2/T]	=	Transversal dispersion ($DT=\alpha T*u$)	
e	(m)	[L]	=	Aquifer thickness	
M_0	(kg)	[M]	=	Mass of injected tracer	
ω	(-)	[-]	=	Effective porosity ($0<\omega<1$)	
Pe	(-)	[-]	=	Péclet number (Pe=x/α)	
P_L	(s)	[T]	=	Time period for approaching the asymptotic value of αL	
P_T	(s)	[T]	=	Time period for approaching the asymptotic value of αT	
q	(m3/s)	[L3/T]	=	Injection rate of tracer	
q_m	(kg/s)	[M/T]	=	Massic injection rate of tracer	
Q_p	(m3/s)	[L3/T]	=	Pumping rate	
r	(m)	[L]	=	Radial distance injection-restitution	
R_t	(-)	[-]	=	Delay factor	
θ	(°)	[-]	=	Angle between the direction of flow and the x-axis	
t	(s)	[T]	=	Time	
$t_{1/2}$	(s)	[T]	=	Half-life (t1/2=ln(2)/λ)	
u	(m/s)	[L/T]	=	Pore velocity	
v	(m/s)	[L/T]	=	Darcy's velocity (v=u*ω)	
x	(m)	[L]	=	Distance between measurement and injection points regarding the x-axis	
y	(m)	[L]	=	Distance between measurement and injection points regarding the y-axis	

Table 2: Symbols and notations used in the formulas

3.1 Uniform 1D flow

(4) BRIEF INJECTION

Brief mass injection in an infinite medium (1)

This solution corresponds to a brief and punctual injection of mass M_0 per cross-sectional unit of aquifer transverse to the flow ($A=e*1$), of thickness e and unit width (Fig. 2). The tracer mass is injected at time $t=0$ at point $x=0$. The tracer moves in terms of the pore velocity in the medium.

If the decay constant λ is defined, the concentration of the transported element is subjected to an exponential decrease of type $C_0.e^{-\lambda t}$ during transport. This solution is modified from [9,10].

$$C(x,t) = \frac{M_0}{A\omega\sqrt{4\pi D_L t}} \exp\left[-\frac{(x-ut)^2}{4D_L t}\right] \exp(-\lambda t) \quad (6)$$

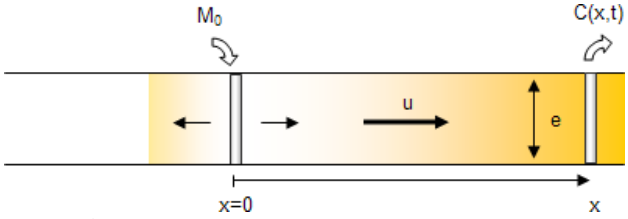


Fig. 2: Brief mass injection in an infinite medium

Brief mass injection in a semi-infinite medium (2)

This solution corresponds to a brief injection of mass M_0 per cross-sectional unit of aquifer transverse to the flow ($A=e*1$), of thickness e and unit width (Fig. 3). The tracer mass is injected at time $t=0$ at point $x=0$. The tracer moves in terms of the pore velocity in the medium.
If the decay constant λ is not defined, the transported element is not subjected to degradation. Otherwise, the degradation is analogue to solution (1). This solution is modified from [19].

$$C(x,t)=\frac{M_0}{A\omega}\left[\frac{2}{\sqrt{4\pi D_L t}}\exp\left(-\frac{(x-ut)^2}{4D_L t}\right)-\frac{u}{2D_L}\exp\left(\frac{ux}{D_L}\right)erfc\left(\frac{(x+ut)}{\sqrt{4D_L t}}\right)\right]\exp(-\lambda t) \quad (7)$$

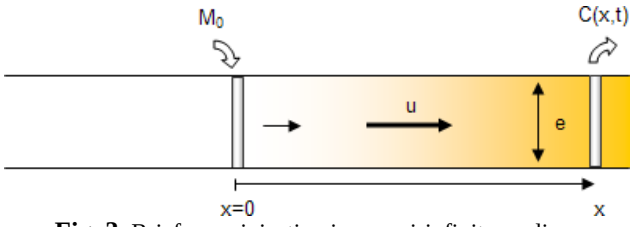


Fig. 3: Brief mass injection in a semi-infinite medium

(5) CONTINUOUS INJECTION

Continuous injection of a constant concentration in an infinite medium (3)

This solution corresponds to continuous injection of a constant concentration at x=0, at time t=0 in an infinite medium (Fig. 4).

If the decay constant λ is not defined the transported element is not subjected to degradation. Otherwise, the degradation is analogue to solution (1).

If the concentration remains constant during injection, the injected mass over the time interval Δt is $M=C_0.\omega.u.A.\Delta t$. The scheme is similar as in solution (1), except that injection is constant. This solution is modified from [16].

$$C(x,t)=\frac{C_0}{2}\left[erfc\left(\frac{x-ut}{\sqrt{4D_L t}}\right)-\exp\left(\frac{ux}{D_L}\right)erfc\left(\frac{x+ut}{\sqrt{4D_L t}}\right)\right]\exp(-\lambda t) \quad (8)$$

$$C_0=\frac{q_m}{A\omega u}$$

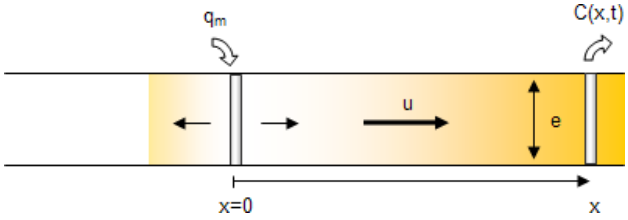


Fig. 4: Injection of a constant concentration in an infinite medium

Continuous injection of a constant concentration in a semi-infinite medium (4)

This solution corresponds to continuous injection of a constant concentration in a semi-infinite medium (Fig. 5). If the decay constant λ is not defined, the transported element is not subjected to degradation. Otherwise, the degradation is analogue to solution (1). This solution is modified from [20,16].

$$C(x,t)=\frac{C_0}{2}\left[erfc\left(\frac{(x-ut)}{\sqrt{4D_L t}}\right)+\exp\left(\frac{ux}{D_L}\right)erfc\left(\frac{x+ut}{\sqrt{4D_L t}}\right)\right]\exp(-\lambda t) \quad (9)$$

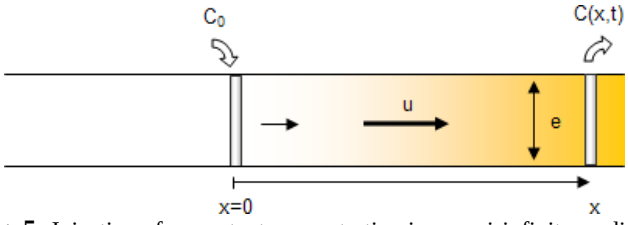


Fig. 5: Injection of a constant concentration in a semi-infinite medium

Continuous injection of a constant concentration in a semi-infinite medium with exponential decay in the aquifer (5)

This solution corresponds to continuous injection of a constant concentration in a semi-infinite medium (Fig. 6). The concentration of the transported element exponentially decreases in groundwater following the relation $C_s=C_0e^{-\lambda t}$, and the source concentration (injection point) is not subjected to degradation and remains constant. This formulation may be used for simulating, as an example, a bacterial degradation occurring only in the groundwater and not in the injection well. This solution is ([11]):

$$C(x,t)=\frac{C_0}{2}\left[\exp\left[\frac{(u-\Gamma)x}{2D_L}\right]erfc\left(\frac{x-\Gamma t}{\sqrt{4D_L t}}\right)\right.$$
$$\left.+\exp\left[\frac{(u+\Gamma)x}{2D_L}\right]erfc\left(\frac{x+\Gamma t}{\sqrt{4D_L t}}\right)\right] \quad (10)$$
$$\Gamma=u\sqrt{1+\frac{4\lambda D_L}{u^2}}$$

The decay term of the element during transport becomes null if the decay constant λ=0, so Γ=u.

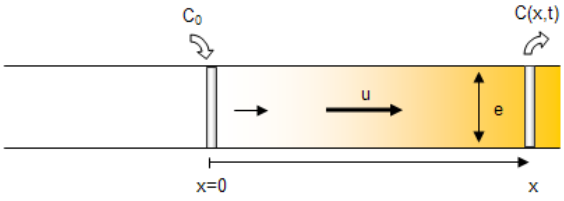


Fig. 6: Continuous injection of a constant concentration in a semi-infinite medium

Continuous injection of a constant concentration in a semi-infinite medium with exponential decay of the source term (6)

This solution corresponds to continuous injection of a constant concentration in a semi-infinite medium, with or without degradation of the transported element (Fig. 7). In this case, exponential degradation of the element occurs both in the groundwater and in the source, as opposed to the previous solution where decay occurs solely in groundwater. This solution is modified from [13, 12].

$$C(x,t)=\frac{C_0}{2}\left[erfc\left(\frac{x-ut}{\sqrt{4D_Lt}}\right)-\exp\left(\frac{ux}{D_L}\right)erfc\left(\frac{x+ut}{\sqrt{4D_Lt}}\right)\left[1+\frac{u(x+ut)}{D_L}\right]+\frac{2ut}{\sqrt{\pi D_Lt}}\exp\left[-\frac{(x-ut)^2}{4D_Lt}\right]\right]\exp(-\lambda t) \quad (11)$$

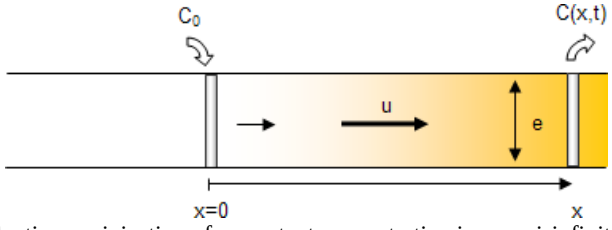


Fig. 7: Continuous injection of a constant concentration in a semi-infinite medium

3.2 Uniform 2D flow

(6) BRIEF INJECTION

Brief injection of a mass in a semi-infinite medium (7)

This solution corresponds to a brief injection of mass M_0 per aquifer thickness unit, with or without degradation of the transported element (exponential decay) (Fig. 8). The injection occurs at point *(x,y) = (0,0)*, the concentration is computed at point *(x,y)*. The flow direction is assumed parallel to the x-axis; if it is not the case the next solution may be more accurate, as it allows specifying an angle for the flow direction. This solution is modified from [14]:

$$C(x,y,t)=\frac{M_0}{4\pi e\omega t\sqrt{D_LD_T}}\exp\left[-\frac{(x-ut)^2}{4D_Lt}-\frac{y^2}{4D_Tt}\right]\exp(-\lambda t) \quad (12)$$

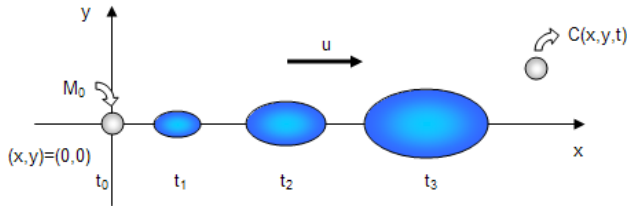


Fig.8: Brief injection of mass in a 2D infinite medium

Brief injection of mass in an infinite medium with flow direction (8)

This solution is a modified version of the previous one, corresponding to a brief injection of mass M_0 per aquifer thickness unit, including the direction of flow θ diverging from the x-axis (Fig. 9). This solution is modified from [14]:

$$C(x,y,t)=\frac{M_0}{4\pi e\omega t\sqrt{D_LD_T}}\exp\left[-\frac{(x'-ut)^2}{4D_Lt}-\frac{y'^2}{4D_Tt}\right]\exp(-\lambda t)$$

with

$$x'=x\cos\theta+y\sin\theta$$
$$y'=x\sin\theta+y\cos\theta \quad (13)$$

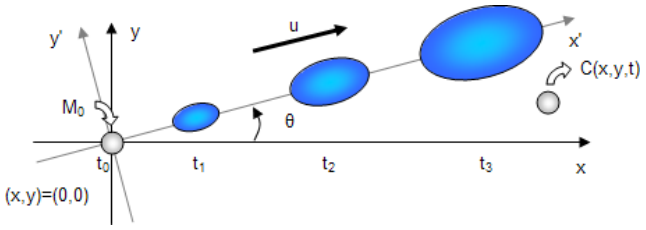


Fig. 9: Brief injection of mass in a 2D infinite medium, with a specified direction of the flow

Brief injection of mass in a semi-infinite medium with variable dispersivity (9)

This solution corresponds to a brief injection of mass M_0 per aquifer thickness unit, subjected to a constant flux directed parallel to the x-axis (injection axis – restitution point). This analytical solution incorporates the observed growth of dispersivity values with flow time or flow distance. The scale effect is considered by using time-dependent dispersivity values. This solution with varying dispersivity values requires two additional input parameters (P_L and P_T).

The longitudinal and transversal dispersivity increase with distance of transport and inflect to become asymptotic to a maximum value. P_L and P_T are the two fitting parameters representing the time needed to reach the asymptotic value of the longitudinal and transversal dispersivity (α_L and α_T).

The scheme of this solution is analogue to that of Figure 8. This solution is ([15]):

$$C(x,y,t) = \frac{M_0}{2\pi e\omega\sigma_L(t)\sigma_T(t)}\exp\left[-\frac{(x-ut)^2}{2\sigma_L{}^2(t)} - \frac{y^2}{2\sigma_T{}^2(t)}\right]\exp(-\lambda t) \quad (14)$$

I. *with*

$$\sigma_L{}^2(t) = 2\alpha_L ut\left[1 + \frac{P_L}{t}\left(\exp\left(-\frac{t}{P_L}\right)\right) - 1\right]$$

$$\sigma_T{}^2(t) = 2\alpha_T ut\left[1 + \frac{P_T}{t}\left(\exp\left(-\frac{t}{P_T}\right)\right) - 1\right]$$

(7) CONTINUOUS INJECTION

Continuous injection of mass flux in an infinite medium (10)

This solution corresponds to a continuous injection of concentration at a defined injection rate (mass flux: $q_m = q.C0$, mass per unit of time and per unit of aquifer thickness) in an infinite medium (Fig. 10). This solution is ([3]).

$$C(x,y,t) = \frac{qC_0}{4\pi e\omega u\alpha_L\alpha_T}\int_0^t \frac{1}{t}\exp\left(-\frac{(x-ut)^2}{4\alpha_L ut} - \frac{y^2}{4\alpha_T ut}\right)\exp(-\lambda t)dt \quad (15)$$

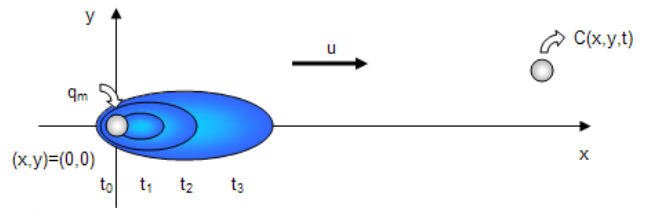


Fig.10: Constant injection of mass flux in a 2D infinite medium

Continuous injection of mass flux in an infinite medium with variable dispersion (11)

This solution is a modified version of the previous one that includes dispersivity values increasing over flow time. This solution is ([3]):

$$C(x,y,t)=\frac{qC_0}{2\pi e\omega}\int_0^t \frac{\exp\left(\frac{(x-ut)^2}{2\sigma_L{}^2(t)}-\frac{y^2}{2\sigma_T{}^2(t)}\right)\exp(-\lambda t)}{\sigma_L(t)\sigma_L(t)}dt$$

with (16)

$$\sigma_L{}^2(t)=2\alpha_L ut\left[1+\frac{P_L}{t}\left(\exp\left(-\frac{t}{P_L}\right)\right)-1\right]$$

$$\sigma_T{}^2(t)=2\alpha_T ut\left[1+\frac{P_T}{t}\left(\exp\left(-\frac{t}{P_T}\right)\right)-1\right]$$

The integral upside can be computed numerically, but the results may be inaccurate for high P_L and P_T values (over 10 days).

3.3 Radial converging flow

(8) BRIEF INJECTION

Brief injection of mass in a radial convergent flow induced by a continuous pumping well (12)

This solution corresponds to a tracer test in a radial convergent flow induced by a continuous pumping well (*Qp*) (Fig. 11). Though until now no exact analytical solution exists, an approximate solution is given by ([18]):

$$C(x,t)=\frac{M_0 r}{2Q_p t^{3/2}\sqrt{\pi\alpha_L u}}\exp\left(-\frac{(r-ut)^2}{4D_L t}\right)\exp(-\lambda t) \qquad (17)$$

The tracer is injected in a lateral observation well located at a distance r from the pumping well. This solution is :

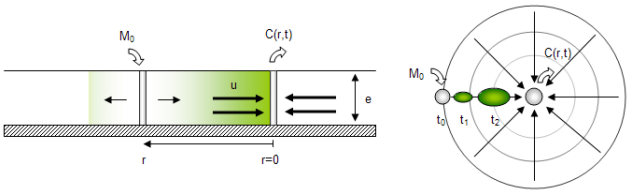


Fig. 11: Brief injection in a radial convergent flow

The Péclet number is the relation between the advective and diffusive transfer:

$$Pe=\frac{r}{\alpha_L}.$$

Note that the approximate solution should be used for Péclet numbers larger than three, i.e. for cases where the distance from the injection point to the pumping well is at least three times as large as the longitudinal dispersivity ($r > 3\alpha_L$).

To address this problem, a new and more accurate semi-analytical solution is being developed and will be added to the next release of TRAC. This solution will allow simulating a tracer in converging (pumping well) or diverging (injection well) radial flow even for smaller Péclet numbers.

4. Validation and example

TRAC has been compared to other ways of computation, either using a spreadsheet program such as EXCEL or a specific development of the analytical solution using FORTRAN language. The objective of these comparisons were to ensure a proper implementation of the formulas in the code. No differences at all were noticed. This validates the tool, but does not validate the formula, which is however supposed to be valid within the limits of its application field, as most of the formulas were already tested in the referenced publications from where they come.

In order to validate the formulas as well, numerical simulations were conducted using a finite volume numerical model, MARTHE [21]. The studied domain is discretised in meshes. Grid extension and boundary conditions depends on the type of problem. The validation procedure and results are published in a specific report [22]. We present below (Fig.12) a breakthrough curve obtained from the simulation of a brief injection (Dirac) of 1 gram of uranine in a semi-infinite medium such as a saturated column which would have the following characteristics:

- Section (area) = 1 sq.m
- porosity = 10 % ;
- permeability = 10-5 m/s ;
- hydraulic gradient=1 m/m
- longitudinal dispersivity = 0.1 m ;
- distance injection-restitution = 0.5 m ;

The model is run in transient mode using a 6 second timestep and a total duration of 10 hours.

The results of this simulation perfectly match the results of analytical solution (2), equation (7) whether it is written within TRAC or with EXCEL.

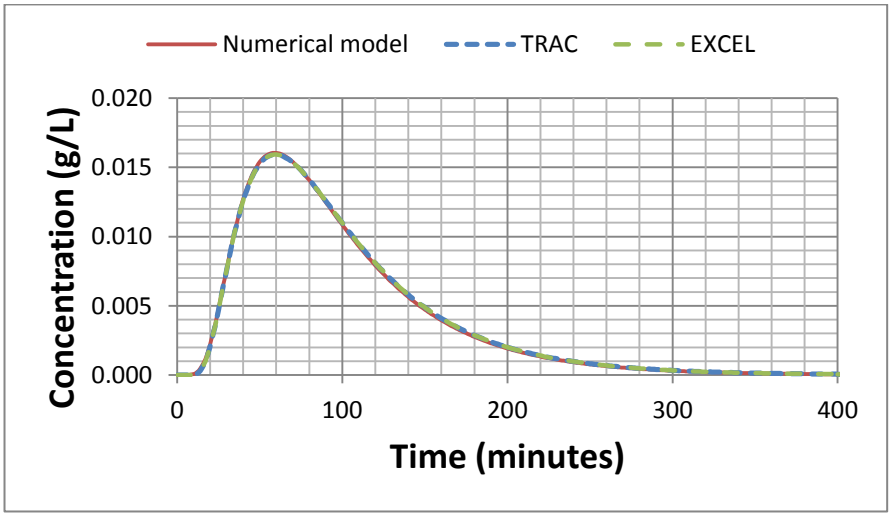


Fig.12 : Comparison between TRAC, EXCEL and a numerical model, MARTHE on a 1D simulation (eq.7)

Another example is given with Fig.13. In this real tracer test performed in an alluvial aquifer, the tracer (uranine) was injected in a piezometer located at 13.9 m from a pumping well. The pumping discharge at 39.5 m3/h induces a radial flux to the well. Aquifer thickness is 6.25 m. The tracer was injected in the saturated zone and homogenized along the whole length of the borehole screen before being flushed. The breakthrough curve is interpreted with formula (12) equation (18) for radial converging flow. The results of the tracer experiment are iteratively fitted using the optimization procedure to give the following values:

Longitudinal dispersivity = 0.64 m ;

Porosity = 0.20.

We verify that the Péclet number (13.9/.64=21.7) is greater than 3.

Other examples are given in the user manual [23].

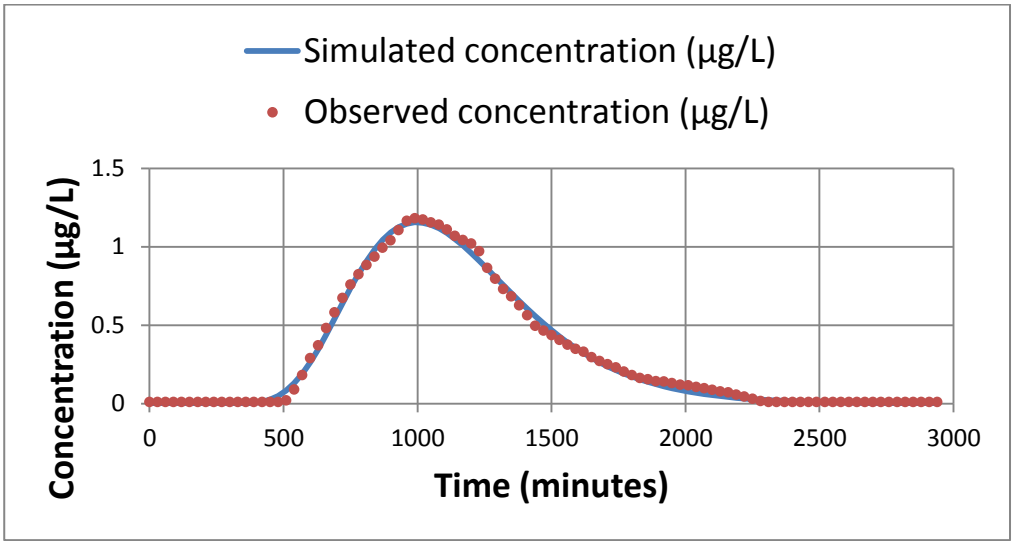


Fig.13 : Observed and computed breakthrough curve using eq.18 (Radial converging flow)

5. Conclusions

The advection-dispersion solute-transport equation quantitatively describes the transport of solutes in groundwater. Analytical solutions that are exact mathematical solutions for this partial differential equation were derived for different combinations (aquifer geometry, boundary, solute source, initial conditions).

TRAC is a simple tool that operates based on validated analytical solutions for simulating solute transport in one-, two- and radial-dimensional systems with uniform flow. The solutions were compiled from those published in the literature and used in some software. TRAC is user-friendly and its GUI is intuitive. Freely available and downloadable, TRAC may benefit from the use by all interested hydrogeologists, who can continuously improve it by introducing their own analytical solutions.

For more information and access, please see our web site: http://trac.brgm.fr

References

1. J.P. Sauty - Mise au point et utilisation d'abaques pour l'interprétation des expériences de traçages dans les nappes d'eau souterraine. Bulletin du BRGM, Section III, n°4-197, pp. 285-291, (1978)
2. J.P. Sauty - Utilisation des traceurs pour définir les périmètres de protection. Rapport BRGM n°87-SGN-287-EAU (1987)
3. J.P. Sauty, W. Kinzelbach, A. Voss - Computer Aided Tracer Test Interpretation (CATTI), program documentation, International Ground Water Modeling Center, Golden, Colorado, 64 p. (1992)

4. W.L. Nieman, C.W. Rovey II - A systematic field-based testing program of hydraulic conductivity and dispersivity over a range in scale. Hydrogeology Journal 17: 307–320 (2009)
5. N. Toride, F.J. Leij, M.Th. van Genuchten - The CXTFIT code for estimating transport parameters from laboratory or field tracer experiments. Version 2.0, Research Report n°137, US Salinity Laboratory (1995)
6. W. Käss - Tracing Technique in Geohydrology, A. A. Balkema, Rotterdam, Brookfield, Vt., 581 p. (1998)
7. M. Field - The QTRACER2 program for tracer-breakthrough curve analysis for tracer tests in karstic aquifers and other hydrologic systems. EPA/600/R-02/001 (2002)
8. M. Field - Tracer-Test planning using the efficient hydrologic tracer-test design (EHTD) program. EPA/600/R-03/034 (2003)
9. J. Crank - The mathematics of diffusion. 347 pp. London: Oxford University Press. 1956
10. J. Bear -. Dynamics of fluids in porous media. New York: Elsevier (1972)
11. M.Th. van Genuchten - Analytical solutions for chemical transport with simultaneous adsorption, reo-order production and first order decay. Journal of Hydrology 49, 213-233 (1981)
12. N.D. Gershon, A. Nir - Effects of boundary conditions of models on tracer distribution in flow through porous mediums: Water Resources Research 5, 830-839 (1969)
13. K.H. Coats, B.D. Smith - Dead-end pore volume and dispersion in porous media. Pet. Trans AIME, 231 SPEJ 73, 73–84 (1964)
14. J.J. Fried -, Groundwater pollution, New York: American Elsevier, 930 p. (1975)
15. G.T. Csanady - Turbulent Diffusion in the Environment, Dordrecht: Reidel (1973)
16. J.P. Sauty, Contribution à l'identification des paramètres de dispersion dans les aquifers par l'interprétation des expériences de traçage. Thèse Doct.-Ing. Grenoble (1977)
17. D. Thiéry, Modélisation 3D du transport de masse avec le logiciel MARTHE Version 5.4. BRGM Report R38149 HYT/DR 95, 171 pp. (1995)
18. J.P. Sauty, Identification des paramètres du transport hydrodispersif dans les aquifères par interprétation de traçages en écoulement cylindrique convergent ou divergent, Journal of Hydrology, vol.39, No 1-2, pp 69-103, (1978)
19. M. De Vries in " Tracer Techniques in Sediment Transport. Int. Atomic Energy Agency I.A.E.A., Vienna (1973), 105-123.
20. A. Ogata, R.B. Banks – A solution of the differential equation of longitudinal dispersion in porous media. US Geological Survey, Professional paper 411-A (1961)
21. D.Thiéry - Modélisation des aquifères complexes - Prise en compte de la zone non saturée et de la salinité. Calcul des intervalles de confiance. Revue Hydrogéologie. no. 4: 325–336.
22. T. Klinka, A. Gutierrez, D. Thiéry. Validation du logiciel TRAC : Aide à l'interprétation de traçages en milieu poreux. BRGM report RP-59425-FR (in French) available on the Trac web site and at http://www.brgm.fr/publication.jsp (2012)
23. A.Gutierrez, T.Klinka, D.Thiery. Manuel d'utilisation de TRAC : Aide à l'interprétation de traçages en milieux poreux. BRGM report RP-60660-FR (in French) available on the Trac web site and at http://www.brgm.fr/publication.jsp (2012)

Centre scientifique et technique
Service EAU
3, avenue Claude-Guillemin
BP 36009 – 45060 Orléans Cedex 2 – France – Tél. : 02 38 64 34 34